

Simulation von Naseninnenströmungen mit Lattice-BGK Methoden

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Markus Finck
aus
Duisburg

Referent: Prof. Dr.-Ing. D. Hänel
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. W. Schröder

Tag der mündlichen Prüfung: 11. Juli 2007

Vorwort

Die vorliegende Arbeit stammt aus meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Verbrennung und Gasdynamik (IVG) der Universität Duisburg-Essen. Das Thema dieser Arbeit, die Simulation von Naseninnenströmungen mit LBGK-Methoden, ist für einen ingenieurwissenschaftlichen Fachbereich sicherlich ungewöhnlich, aber sehr interessant und herausfordernd. Ursprünglich als interdisziplinäres Verbundprojekt geplant, wurde daraus im Wesentlichen ein Projekt, in dessen Kontext numerische Methoden genutzt und weiterentwickelt wurden, um später als Werkzeug für den klinischen Einsatz zu dienen.

Ich möchte all den Leuten meinen Dank aussprechen, die es möglich gemacht haben, dass mein Aufenthalt hier am IVG so angenehm und harmonisch verlaufen ist. Dies gilt insbesondere für meine Familie und meine Freunde, aber auch den Mitarbeitern und Studenten des Instituts.

Darüber hinaus möchte ich den Mitarbeitern des Aerodynamischen Instituts der RWTH Aachen für die gute Zusammenarbeit danken. Ein Großteil der hier verwendeten Vergleichsdaten basiert auf den dort erzielten Forschungsergebnissen.

Mein Dank gilt darüber hinaus der Deutschen Forschungsgemeinschaft, die dieses Projekt gefördert hat.

Duisburg, im August 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	9
2	Der LBGK-Algorithmus	11
2.1	Grundgleichungen der kinetischen Gastheorie	11
2.1.1	Verteilungsfunktionen und Momente	11
2.1.2	Boltzmann-Gleichung und Maxwell-Verteilung	13
2.2	Das BGK-Modell	16
2.3	Die LBGK-Methode	17
2.3.1	Diskretes BGK-Modell	18
2.3.2	Diskrete Momentenbildung und diskrete Maxwell-Verteilung . .	19
2.3.3	Konsistenz	21
2.3.4	Betrachtung auf makroskopischen Skalen	26
2.3.5	Der Basisalgorithmus	28
2.4	Randbedingungen	30
2.4.1	Bounce-Back- und Gleichgewichtsrandbedingungen	30
2.4.2	Boundary Fitting-Randbedingungen	31
2.5	Erweiterungen der LBGK-Methode	32
2.5.1	Lokale Gitterverfeinerung	32
2.5.2	Anwendung lokaler Dämpfungsterme	34
3	Geometrieverarbeitung und Gittererzeugung	37
3.1	Handhabung von Geometriedaten	37
3.1.1	Boundary Representation	37
3.1.2	Isogrenzfläche	38
3.2	Generierung von Oberflächengittern	38
3.2.1	Oberflächentriangulierung von BRep-Körpern	38
3.2.2	Oberflächentriangulierungen von 3-D-Graustufenbildern	43
3.2.3	Verarbeitung von Dateien im STL-Datenformat	44
3.2.4	Randcodierung	45
3.3	Kartesische Gitter mit Octree-Verfeinerung	46
3.3.1	Speicherung der Gitterpunkte	48
3.3.2	Speicherung der Gitterelemente	49

3.3.3	Gittererzeugung	50
3.4	Anpassung der LBGK-Methode auf Octree-Gitter	55
3.5	Beispielgeometrien	58
4	Integriertes Softwarekonzept	59
4.1	Motivation	59
4.2	Modulares Konzept	59
4.2.1	Schnittstellentechnik	60
4.2.2	Aufbau der Module	61
5	Weitergehende Transportmodelle	63
5.1	Temperatur- und Wasserdampftransport	63
5.1.1	Thermodynamik der Nase	63
5.1.2	Transportgleichungen für Wärme- und Stofftransport	64
5.1.3	Diskretisierung	65
5.1.4	Randbedingungen	66
5.2	Partikeltransport	67
5.2.1	Modellierung der Partikelphase	67
5.2.2	Bewegungsgleichungen sphärischer Partikel	68
5.2.3	Kräfte am Partikel	68
5.2.4	Diskretisierung und Verfolgung der Partikeltrajektorien	70
6	Validierungsrechnungen	71
6.1	Validierung des LBGK-Algorithmus	71
6.1.1	Laminar durchströmtes Rohr	71
6.1.2	Laminare Zylinderumströmung	73
6.2	Validierung des Partikeltransports	76
6.3	Validierung des Temperatur- und Wasserdampftransports	79
7	Strömung durch ein Nasenmodell	83
7.1	Strömung durch ein Nasenmodell	83
7.2	Geometrie und Rechengitter	84
7.3	Stationäres Ein- und Ausatmen	84
7.4	Instationäres Ein-/Ausatmen	88
7.5	Partikeltransport in der Nase	91
7.6	Resultate des Wärme- und Stofftransports	95
8	Zusammenfassung und Ausblick	99
A	Algorithmen	101
A.1	Octree-Punktsuche	101
A.2	Ermittlung der Elementnachbarschaft	103

B Beweise	105
B.1 Stabilität der LBGK-Methode	105
B.2 Herleitung von t_p	106
C Momententabelle	109
C.1 Momente der kontinuierlichen Verteilungsfunktion	109
C.2 Diskrete Momente	110

Kapitel 1

Einleitung und Motivation

Die Fluidströmung durch die menschliche Nasenhaupthöhle ist ein sehr komplexes strömungsmechanisches Problem, dessen Verständnis für die Hals- Nasen- und Ohrenmedizin (HNO) von großem Interesse ist. Da auch in der klinischen Praxis der Computer zu einem unverzichtbaren Instrument geworden ist, liegt seine Nutzung zur Klärung noch offener medizinischer Fragestellungen nahe. Viele dieser Fragen, wie eben das Problem der Naseninnenströmung, sind jedoch nur im Rahmen eines interdisziplinären Ansatzes (z.B. zusammen mit Ingenieurwissenschaften) zu beantworten. Die vorliegende Arbeit verfolgt einen solchen Ansatz.

Die meisten im Rahmen der HNO durchgeführten chirurgischen Eingriffe finden im Bereich der Nasenhaupthöhle statt. Dieser Bereich wird von der Atemluft durchströmt. Ein Ziel hierbei ist es, das Wohlbefinden des Patienten bei der Atmung zu verbessern. Dieses subjektiv empfundene Wohlbefinden hängt jedoch von der Beschaffenheit der Strömung in der Nase und somit von deren Geometrie ab. Darüber hinaus können beispielsweise mit der Atemluft mitgeführte Partikel an bestimmten Stellen der Nasenschleimhaut abgelagert werden und diese lokal reizen. Bei einem operativen Eingriff sollten diese Effekte berücksichtigt werden, um ein optimales Operationsergebnis zu erzielen.

Da die Nasenhaupthöhle für in-vivo-Messung schwer zugänglich ist, scheint der Einsatz von numerischen Methoden zur Strömungsberechnung naheliegend. Ein geeignetes Verfahren ist in der Lage, sowohl die Luftströmung zu modellieren als auch zusätzliche physikalische Effekte wie Klimatisierung und Partikeltransport zu berücksichtigen. Es existieren viele verschiedene Verfahren zur Simulation dieser Transporteffekte, deren Wahl maßgeblich von der speziellen Aufgabenstellung abhängt.

Das in dieser Arbeit behandelte Lattice-BGK Verfahren scheint für die Simulation der Naseninnenströmung besonders geeignet zu sein. Die Vorteile dieses Verfahrens liegen in seiner hohen Genauigkeit sowohl im Ort als auch in der Zeit bei vergleichsweise geringem Aufwand für Implementierung und Rechnung sowie der guten Eignung für Parallelisierung. Nachteilig ist die Beschränkung auf kartesische Rechengitter. Dieser Nachteil relativiert sich jedoch, da die Verwendung eines solchen Gitters für die vor-

liegende Problemstellung ohnehin zweckmäßig erscheint (vgl. Kapitel 3). Ein weiterer Nachteil des LBGK-Verfahrens ist sein vergleichsweise hoher Speicheraufwand.

Die Simulation der Naseninnenströmung und der damit verbundenen Transporteffekte ist Gegenstand zahlreicher Publikationen. In Martonen et al. [28] wird ein kommerzielles Programmpaket (CFX) in Kombination mit blockstrukturierten Gittern genutzt, um die reine Luftströmung durch die Nasenhaupthöhle zu berechnen. Die Arbeitsgruppe Zhao et al. [46] nutzt das selbe Paket, jedoch in Verbindung mit einem unstrukturierten Tetraeder/Prismengitter sowie einer passiv transportierten Phase, die den Transport von riechbaren Substanzen modelliert. Hörschler et al. [22] nutzten ebenfalls ein blockstrukturiertes Gitter in Verbindung mit einem kompressiblen Finite-Volumen-Verfahren.

Die Verwendung von blockstrukturierten oder unstrukturierten Gittern hat den Vorteil, dass die Randpunkte geometriekonform positioniert sind. Dadurch lassen sich Randbedingungen sehr genau implementieren. Besonders für die Berechnung der Wandschubspannungen ist dies vorteilhaft. Andererseits ist die Gittererzeugung, insbesondere im Falle von blockstrukturierten Gittern, sehr zeit- und arbeitsaufwändig. Unstrukturierte Gitter können dagegen zwar weitgehend automatisch erzeugt werden, benötigen jedoch ein qualitativ gutes Oberflächengitter.

Ziel dieser Arbeit ist die Simulation von Naseninnenströmungen mit Hilfe des LBGK-Verfahrens auf Octree-Gittern, d.h. kartesischen Gittern mit hierarchischer Verfeinerung. Diese sind ebenfalls weitgehend automatisch und mit dem kleinsten Aufwand zu erzeugen, sind jedoch nicht randkonform. Dadurch ist die Implementierung von Randbedingungen auf diesen Gittern schwierig. Andererseits können auf Octree-Gittern sehr effiziente Lösungsverfahren formuliert werden.

Neben der eigentlichen Luftströmung werden in dieser Arbeit weitere Transporteffekte, insbesondere Wärme-, Wasserdampf- und Partikeltransport simuliert. Es wird außerdem eine Methodik vorgestellt, mit der alle Arbeitsschritte von der Geometrieverarbeitung bis zum Berechnungsergebnis in einem Programm integriert werden können. Als Teil eines interdisziplinären Forschungsvorhabens sollen die im Rahmen dieser Arbeit gewonnenen Ergebnisse sowohl mit experimentellen Daten [35] als auch mit dem Finite-Volumen-Ansatz aus [22] verglichen werden. Ausgangspunkt ist die CT-Aufnahme einer „Modellnase“, mit deren Hilfe alle relevanten Experimente und Berechnungen durchgeführt wurden.

Kapitel 2

Der LBGK-Algorithmus

2.1 Grundgleichungen der kinetischen Gastheorie

Der Lattice-BGK (LBGK-) Algorithmus dient zur Berechnung der Strömung von inkompressiblen, viskosen Newton'schen Fluiden. Seine hier beschriebene Version wurde erstmals von [38] publiziert. Der LBGK-Algorithmus approximiert nachweislich die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen für Kontinuumsströmungen, basiert aber zugleich auf den Transportgleichungen der kinetischen Gastheorie. Aus diesem Grunde wird hier zunächst auf den theoretischen Hintergrund der LBGK-Methode eingegangen.

2.1.1 Verteilungsfunktionen und Momente

In der kinetischen Gastheorie werden Gase - im Kontrast zum Kontinuumsansatz - als Ansammlung von meist als kugelförmig angenommenen Molekülen betrachtet. Wegen deren großen Anzahl in makroskopischen Skalen wird für deren mathematische Beschreibung ein statistischer Ansatz bevorzugt.

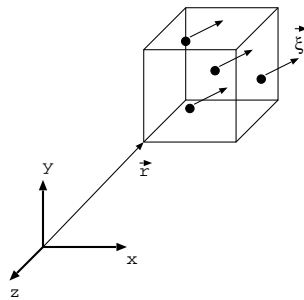


Abbildung 2.1: Phasenraum ΔV , $\Delta \xi$ um Ortskoordinate \vec{r} und Molekulargeschwindigkeit $\vec{\xi}$.

Innerhalb eines Teilvolumens ΔV mit Ortsvektor \vec{r} wird die Anzahl der Moleküle Δn ,

die sich zur Zeit t in einem Geschwindigkeitsspektrum $\Delta\xi$ um die mittlere Molekulargeschwindigkeit $\vec{\xi}$ bewegt, mit der Verteilungsfunktion

$$f = f(t, \vec{r}, \vec{\xi}) = \frac{\Delta n}{\Delta V \Delta \xi}$$

identifiziert (Abbildung 2.1). Diese Verteilungsfunktion beschreibt prinzipiell alle makroskopischen Zustandsgrößen eines gasförmigen Fluids, inklusive der Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Energie. Das Tupel aus Ortsvektor \vec{r} und Vektor der molekularen Geschwindigkeit $\vec{\xi}$ wird als Phasenraum bezeichnet.

Die makroskopischen Zustandsgrößen eines Gases, dessen Verteilungsfunktion f bekannt ist, werden über deren Momente berechnet. Dies geschieht im allgemeinen durch Multiplikation mit einer Funktion $\Phi(\vec{\xi})$ und anschließender Integration über den vollständigen molekularen Geschwindigkeitsraum. Die Teilchendichte n beispielsweise ist definiert als

$$n(t, \vec{r}) = \int_{\vec{\xi}} \Phi(\vec{\xi}) f(t, \vec{r}, \vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad \text{mit} \quad \Phi(\vec{\xi}) = 1$$

oder in Komponentenschreibweise

$$n(t, x, y, z) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} f(t, x, y, z, \xi_x, \xi_y, \xi_z) d\xi_x d\xi_y d\xi_z.$$

Die Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Energie werden gleichfalls über Momentenbildung bestimmt. Diese lauten, bezogen auf ein geeignet gewähltes Teilvolumen ΔV :

$$\rho = m \int_{\vec{\xi}} f d\vec{\xi} \tag{2.1}$$

$$\rho \vec{u} = m \int_{\vec{\xi}} \vec{\xi} f d\vec{\xi} \tag{2.2}$$

$$\frac{1}{2} \rho \vec{u}^2 + \rho e = \frac{m}{2} \int_{\vec{\xi}} \xi^2 f d\vec{\xi} \tag{2.3}$$

mit der Molekularmasse m , ρ als Massendichte, \vec{u} als mittlerer makroskopischer Fluidgeschwindigkeit und e als innerer oder thermischer Energie.

Die makroskopische Geschwindigkeit \vec{u} ist als mittlere Geschwindigkeit der gesamten Molekülwolke bezüglich eines ortsfesten Koordinatensystems zu verstehen. Dem gegenüber steht die thermische Geschwindigkeit \vec{c} , die definiert ist zu

$$\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u} \quad (2.4)$$

und keinen Beitrag zur geordneten, makroskopischen Bewegung leistet, bei der Definition makroskopischer Transportkoeffizienten und thermischer Zustandsgrößen jedoch eine wichtige Rolle spielt.

2.1.2 Boltzmann-Gleichung und Maxwell-Verteilung

Die wichtigste und umfassendste Gleichung im Rahmen der kinetischen Gastheorie ist die Boltzmann-Gleichung. Sie beschreibt den Transport einer Verteilungsfunktion $f(t, \vec{r}, \vec{\xi})$, wobei t die Zeit und \vec{r} den Ort repräsentieren. $\vec{\xi}$ beschreibt eine molekulare Geschwindigkeit. Die Größe f repräsentiert somit die Anzahl der Gasmoleküle, die sich mit einer Geschwindigkeit um $\vec{\xi}$ bewegen, zum Zeitpunkt t in einem Volumen ΔV , das an der Ortskoordinate \vec{r} liegt.

Innerhalb des Teilvolumens ΔV , $\Delta \xi$ können Moleküle kollidieren, wobei sich Richtung und Betrag ihrer molekularen Geschwindigkeiten ändern. Dies führt zu einer veränderten Verteilungsfunktion, der Postkollisionsverteilung f' . Allgemein führen die Kollisionsvorgänge zu einem Quellterm für die Verteilungsfunktion f , wobei nur solche Moleküle berücksichtigt werden, die durch eine binären Kollision (Zweierstoß) in den Geschwindigkeitsraum um $\vec{\xi}$ gelangen. Deren ursprünglicher Geschwindigkeitsraum wird mit $\vec{\xi}_1$ bezeichnet, die dazugehörige Verteilungsfunktion mit $f_1(t, \vec{r}, \vec{\xi}_1)$ und die Postkollisionsverteilung mit f'_1 . Die vollständige Boltzmann-Gleichung lautet unter Vernachlässigung externer Kräfte

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \iint_{\vec{\xi}_1 A_c} (f' f'_1 - f f_1) \vec{g} dA_c d\vec{\xi}_1. \quad (2.5)$$

Hierbei wurde über den Geschwindigkeitsraum um $\vec{\xi}_1$ und den molekularen Wirkungsquerschnitt A_c integriert. Die Größe \vec{g} bezeichnet die Relativgeschwindigkeit $\vec{g} = \vec{\xi}_1 - \vec{\xi}$ zwischen den Phasenräumen.

Für die asymptotische Skalenanalyse wird die dimensionslose Form der Boltzmann-Gleichung genutzt:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{t}} + \bar{\xi} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{x}} = \frac{1}{Kn} \iint_{\bar{\xi}_1 \bar{A}_c} (\bar{f}' \bar{f}'_1 - \bar{f} \bar{f}_1) \bar{g} d\bar{A}_c d\bar{\xi}_1 \quad (2.6)$$

mit der Knudsen-Zahl

$$Kn = \frac{l_f}{L} \quad (2.7)$$

und den dimensionslosen Variablen

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \frac{\vec{x}}{L} & \bar{t} &= t \cdot \frac{L}{c_0} & \bar{\xi} &= \frac{\vec{\xi}}{c_0} & \bar{g} &= \frac{\vec{g}}{c_0} \\ \bar{f} &= f \cdot \frac{c_0^3}{n} & d\bar{A}_c &= dA_c \cdot n l_f.\end{aligned}$$

Für die Normierung wurden die mittlere freie Weglänge l_f , eine makroskopische Körperabmessung L , eine typische Teilchendichte n und die mittlere Molekülgeschwindigkeit c_0 herangezogen.

Die Boltzmanngleichung beinhaltet die Grundgleichungen der Kontinuumsstheorie als asymptotische Lösung für verschwindende Knudsenzahl $Kn \rightarrow 0$. In diesem Bereich verschwinden die konvektiven Terme auf der linken Seite der Boltzmanngleichung und es stellt sich ein instantaner Gleichgewichtszustand ein. Die Boltzmanngleichung reduziert sich dabei zu

$$f' f'_1 = f f_1, \quad (2.8)$$

da das Kollisionsintegral unabhängig von der Wahl der Integrationsgrenzen verschwindet. Logarithmiert man (2.8), so ergibt sich die Beziehung

$$\ln f' + \ln f'_1 = \ln f + \ln f_1 \quad (2.9)$$

Diese Bedingung kann als Erhaltungsgesetz von Molekülen der Sorte f und f_1 vor und nach einer elastischen Kollision interpretiert werden. Hierzu werden zunächst die Stoßinvarianten für zwei Moleküle der Masse m und m_1 sowie der Geschwindigkeiten $\vec{\xi}$ und $\vec{\xi}_1$ betrachtet. Die Massen-, Impuls- und Energiebilanzen für den Zustand vor und (durch ein Apostroph ' bezeichnet) nach dem Stoß lauten

$$\begin{aligned}m + m_1 &= m' + m'_1 \\ m \vec{c} + m_1 \vec{c}_1 &= m' \vec{c}' + m'_1 \vec{c}'_1 \\ \frac{m}{2} \vec{c}^2 + \frac{m_1}{2} \vec{c}_1^2 &= \frac{m'}{2} \vec{c}'^2 + \frac{m'_1}{2} \vec{c}'_1{}^2\end{aligned}$$

Für die Wahl der Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß ist die Betrachtung der thermischen Geschwindigkeit \vec{c} ausreichend, da sich der Gesamtimpuls der beiden betrachteten Moleküle nicht verändert und somit ihre mittlere Geschwindigkeit \vec{u} konstant bleibt.

Die Stoßinvarianten besitzen eine formale Ähnlichkeit mit Gleichung (2.9) und drücken denselben Sachverhalt aus. Da (2.9) alle Stoßinvarianten zugleich erfüllen muss, werden diese in einer Linearkombination superponiert:

$$\ln F = A m + \vec{B} m \vec{c} + C \frac{m}{2} \vec{c}^2.$$

Hierbei weist der Großbuchstabe F auf eine kontinuierliche Verteilungsfunktion für ein Gas im Gleichgewicht hin. Diese Vereinbarung wird im weiteren Verlaufe des Dokumentes beibehalten. Es ergibt sich der Zusammenhang

$$F = \exp \left(A m + \vec{B} m \vec{c} + C \frac{m}{2} \vec{c}^2 \right)$$

oder mittels Normierung mit $\frac{2}{Cm}$ und quadratischer Ergänzung $(\vec{B}/C)^2 - (\vec{B}/C)^2$

$$F = \exp \left[C \frac{m}{2} \left(\frac{2A}{C} - \left(\frac{\vec{B}}{C} \right)^2 \right) + C \frac{m}{2} \left(\vec{c} + \frac{\vec{B}}{C} \right)^2 \right].$$

Da die Funktion F im Falle eines Gases im Gleichgewicht keine Vorzugsrichtung aufweisen darf, d.h. kugelsymmetrisch um $\vec{c} = 0$ angeordnet sein muss und damit

$$F(\vec{c}) = F(-\vec{c}) \quad (2.10)$$

gilt, erhält man sofort den Koeffizienten $\vec{B} = 0$.

Die unbekannten Koeffizienten A und C werden mittels Momentenbildung bestimmt. Dazu werden die Momente n (Teilchendichte) und ρe (Teilchenenergie) angesetzt:

$$n = \int_{\vec{c}} \exp \left[A m + C \frac{m}{2} \vec{c}^2 \right] d\vec{c}$$

und

$$\rho e = \rho \frac{3}{2} R T = \frac{m}{2} \int_{\vec{c}} \vec{c}^2 \cdot \exp \left[A m + C \frac{m}{2} \vec{c}^2 \right] d\vec{c}$$

mit Temperatur T und der Gaskonstante R . Nach einigen algebraischen Umformungen sowie unter Benutzung der Integralbeziehungen aus [20] erhält man die Ausdrücke

$$\exp [A m] = \frac{n}{(2\pi R T)^{3/2}} \quad (A \text{ wird nicht explizit benötigt})$$

und

$$C = -\frac{1}{m R T}.$$

Damit ergibt sich die Maxwell- oder Gleichgewichtsverteilung zu

$$F = \frac{n}{(2\pi R T)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\vec{c}^2}{2 R T} \right] \quad (2.11)$$

Die Zahlenwerte für F werden aufgrund des linearen Zusammenhangs mit der Teilchendichte n sehr groß. Aus diesem Grund gibt es eine in der Literatur häufig anzutreffende Variante der Maxwell-Verteilung, die mit der Molekülmasse m erweitert wurde. Mit $\rho = n m$ erhält man

$$F = \frac{\rho}{(2\pi R T)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\vec{c}^2}{2 R T} \right], \quad (2.12)$$

sodass die Größenordnung $O(F)$ derjenigen der Dichte $O(\rho)$ entspricht. Insbesondere bei der Formulierung der LBGK-Methode wird auf diese Form der Verteilungsfunktion zurückgegriffen.

2.2 Das BGK-Modell

Die Boltzmanngleichung (2.5) ist eine Integro-partielle Differenzialgleichung und kann analytisch nicht allgemeingültig gelöst werden. Ein weiteres Problem bei der Behandlung des Kollisionsintegrals besteht in der Bestimmung von Schließungsansätzen für intermolekulare Vorgänge. Aus diesem Grund wurde das Bhatnagar-, Gross-, Krook- (BGK-) Modell [4] entwickelt, welches die wesentlichen Eigenschaften des Kollisionsintegrals der Boltzmanngleichung beinhaltet. Die Transportgleichung der Verteilungsfunktion f lautet:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \omega (F - f) \quad (2.13)$$

mit der molekularen Kollisionsfrequenz ω und der Maxwellverteilung F . Motivation für die Wahl des rechtsseitigen Relaxationsterms ist die aus dem 2. Hauptsatz der Thermodynamik folgende Bedingung, dass die Verteilungsfunktion f für ein geschlossenes System im stationären Zustand stets gegen die Maxwell-Verteilung F strebt. Diese ist gleichbedeutend mit einem lokalen thermodynamischen Gleichgewicht. Somit gilt auch für das BGK-Modell das H-Theorem [20] und damit der 2. Hauptsatz der Thermodynamik. Es bleibt zu bemerken, dass Gleichung (2.13) vom Typ einer hyperbolischen partiellen Differenzialgleichung mit Quellterm und der Charakteristik $\vec{\xi}$ entspricht.

Mit Hilfe der Chapman-Enskog-Entwicklung (z.B. in [6]) können im Grenzfall $Kn \rightarrow 0$ aus dem BGK-Modell die vollen Navier-Stokes-Gleichungen hergeleitet werden. Für die darin benötigten Transportgrößen erhält man eine gaskinetische Interpretation. So ergibt sich beispielsweise der Tensor der Tangentialspannungen (in Tensornotation) zu

$$\sigma_{ij} = \frac{n k T}{\omega} \cdot \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.14)$$

wobei k die Boltzmann-Konstante und T die Temperatur bezeichnet. Der Vergleich

mit dem Newton'schen Spannungsansatz

$$\sigma_{ij} = \eta \cdot \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$$

liefert sofort eine Definition der dynamischen Zähigkeit η :

$$\eta = \nu \rho = \frac{n k T}{\omega} \quad (2.15)$$

Auch der Wärmestrom q_i kann mit Hilfe dieses Ansatzes bestimmt werden:

$$q_i = -\frac{5}{2} \frac{k}{m} \frac{n k T}{\omega} \cdot \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (2.16)$$

Hier liefert der Vergleich mit dem Fourier-Ansatz

$$q_i = -\lambda \cdot \frac{\partial T}{\partial x_i}$$

die folgende Beziehung für den Wärmeleitungskoeffizienten:

$$\lambda = \frac{5}{2} \frac{k}{m} \frac{n k T}{\omega}. \quad (2.17)$$

2.3 Die LBGK-Methode

Die LBGK-Methode basiert auf der BGK-Gleichung (2.13). Diese lautet

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} = \omega (F - f)$$

Weiterhin wird ein diskreter Geschwindigkeitsraum bestehend aus einem Satz diskreter molekularer Geschwindigkeitsrichtungen vorausgesetzt, wie er durch die eingezeichneten Vektoren in Abbildung 2.2 dargestellt ist.

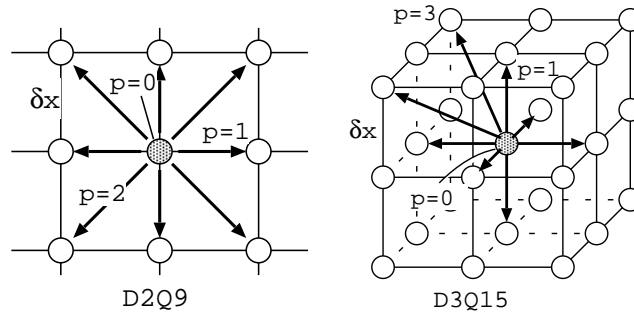


Abbildung 2.2: Diskreter Geschwindigkeitsraum in 2-D und 3-D

Diese Wahl begrenzt die Anzahl der diskreten molekularen Geschwindigkeiten $\vec{\xi}$ auf

einen endlichen Wert. Jedem Punkt des als kartesisch-äquidistant angenommenen Rechengitters sind diskrete Geschwindigkeitsrichtungen i zugeordnet (9 in 2-D, 15 in 3-D), auf welchen die zugehörigen diskreten Verteilungsfunktionen f_i separat gespeichert werden.

Der Faktor p bezeichnet dabei den quadrierten Betrag $p = (\vec{\delta x}_i / \delta x_\alpha)^2$ der mit der kartesischen Gitterschrittweite δx_α , $\alpha = x, y, z$ normierten „Verbindungsvektoren“ (Lattice links), die an der Geschwindigkeitsrichtung i orientiert sind. Für die beiden in dieser Arbeit relevanten Geschwindigkeitsräume sind die Werte für p in Abhängigkeit von der Geschwindigkeitsrichtung i in der nachfolgenden Tabelle 2.1 zusammengefasst.

	<table><tr><th>p</th><th>i</th></tr><tr><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>1</td><td>1, 3, 5, 7</td></tr><tr><td>2</td><td>2, 4, 6, 8</td></tr><tr><td>3</td><td>—</td></tr></table>	p	i	0	0	1	1, 3, 5, 7	2	2, 4, 6, 8	3	—		<table><tr><th>p</th><th>i</th></tr><tr><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>1</td><td>1, 2, 3, 4, 5, 6</td></tr><tr><td>2</td><td>—</td></tr><tr><td>3</td><td>7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14</td></tr></table>	p	i	0	0	1	1, 2, 3, 4, 5, 6	2	—	3	7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14
p	i																						
0	0																						
1	1, 3, 5, 7																						
2	2, 4, 6, 8																						
3	—																						
p	i																						
0	0																						
1	1, 2, 3, 4, 5, 6																						
2	—																						
3	7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14																						
D2Q9:		D3Q15:																					

Tabelle 2.1: Zusammenhang zwischen p und i

2.3.1 Diskretes BGK-Modell

Für die Diskretisierung werden die partiellen Ableitungen der Verteilungsfunktion f durch Differenzenquotienten 1. Ordnung ersetzt. Die Ortsableitung erfolgt dabei in Richtung $\vec{\delta x}_i$, welche von der betrachteten Geschwindigkeitsrichtung abhängt. Dies liefert für jede Geschwindigkeitsrichtung i die Gleichung

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\delta t} + \vec{\xi}_i \frac{f_i - f_{i-1}^n}{\vec{\delta x}_i} = \omega (f_{i-1}^{eq,n} - f_{i-1}^n) \quad (2.18)$$

wobei die Indizierung $i - 1$ auf den nächstliegenden Punkt entgegen der durch $\vec{\xi}_i$ gegebenen Geschwindigkeitsrichtung bezogen ist, d.h.

$$f_{i-1}|\vec{x} = f_i|_{\vec{x} - \vec{\delta x}_i} \quad \text{und} \quad f_{i-1}^{eq}|\vec{x} = f_i^{eq}|_{\vec{x} - \vec{\delta x}_i}$$

Der Term f^{eq} bezeichnet eine diskrete Variante der Gleichgewichtsverteilung F , die Gegenstand des nächsten Abschnitts sein wird.

Die Zeitschrittweite δt wird derart gewählt, dass eine entlang einer Geschwindigkeitsrichtung i bewegte Verteilung f_i gerade auf dem nächsten Gitterpunkt zu liegen kommt, also

$$\vec{\xi}_i = \frac{\vec{\delta x}_i}{\delta t}. \quad (2.19)$$

In einem kartesisch-äquidistanten Gitter besitzt der Vektor $\vec{\xi}_i$ konstante Komponenten, deren Betrag entweder zu 0 oder zu der skalaren molekularen Geschwindigkeit ξ_s definiert wird. Entlang einer beliebigen Raumrichtung $\alpha = x, y, z$ gilt demnach alternativ zu (2.19) die Beziehung

$$\xi_s = \frac{\delta x_\alpha}{\delta t}.$$

Mit Hilfe dieser Wahl für δt vereinfacht sich die Gleichung (2.18) zu der Automatenvorschrift

$$f_i^{n+1} = f_{i-1}^n + \Omega (f_{i-1}^{eq,n} - f_{i-1}^n) \quad (2.20)$$

mit dem dimensionslosen Relaxationsfaktor $\Omega = \omega \delta t$, der abhängig von der kinematischen Viskosität ν gewählt wird (Diese Abhängigkeit ist schon in Gleichung (2.15) ersichtlich; die Definition für ω im diskreten Modell folgt jedoch in Abschnitt 2.3.3). Es kann gezeigt werden, dass die so gewonnene Iterationsvorschrift in den Grenzen $0 < \Omega < 2$ stabil bleibt (siehe Anhang B.1). In der endgültigen Form wird Gleichung (2.20) aufgespalten in

$$\tilde{f}_{i-1}^n = (1 - \Omega) f_{i-1}^n + \Omega f_{i-1}^{eq,n} \quad (2.21)$$

$$f_i^{n+1} = \tilde{f}_{i-1}^n, \quad (2.22)$$

wobei Gleichung (2.21) als Kollisions- und Gleichung (2.22) als Transportschritt bezeichnet werden.

2.3.2 Diskrete Momentenbildung und diskrete Maxwell-Verteilung

Wie noch zu zeigen ist, approximiert die LBGK-Methode die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen mit einer Genauigkeit von $O(\delta t^2, \delta x^2)$. Die makroskopischen Variablen Druck und Geschwindigkeit können über die diskreten Momente von f ermittelt werden. In Kapitel 2.1 wurde die Berechnung der Erhaltungsgrößen Masse, Impuls und Energie aus den Momenten der Boltzmanngleichung (2.5) vorgestellt.

Aufgrund der Wahl eines eingeschränkten diskreten Geschwindigkeitsraums $\vec{\xi}_i$ mit seinen konstanten Komponenten ξ_s gilt das Erhaltungsprinzip für die Energie nicht mehr für das vorgestellte LBGK-Modell. Vielmehr ist dieser Ansatz als isotherm und inkompressibel zu bezeichnen. Damit ist in Analogie zu den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen der Energietransport entkoppelt.

Mit der konstanten Temperatur T kann sofort eine thermische Referenzgeschwindigkeit (isotherme Schallgeschwindigkeit) $c_s = \sqrt{RT}$ eingeführt werden. Wie noch zu zeigen ist, ist diese Referenzgeschwindigkeit mit der molekularen Geschwindigkeit ξ_s

gekoppelt.

Die makroskopischen Größen P (Druck) und u, v, w (Geschwindigkeiten) können mit Hilfe der isothermen Schallgeschwindigkeit c_s und der konstanten Fluidichte ρ_0 direkt aus den Verteilungsfunktionen ermittelt werden. Dabei wird davon ausgegangen, dass alle Verteilungsfunktionen f_i bereits mit den Molekülmassen m multipliziert wurden:

$$P = c_s^2 \sum_i f_i \quad (\text{Nulltes Moment}) \quad (2.23)$$

und

$$u = \frac{1}{\rho_0} \sum_i \xi_{i,x} f_i, \quad v = \frac{1}{\rho_0} \sum_i \xi_{i,y} f_i, \quad w = \frac{1}{\rho_0} \sum_i \xi_{i,z} f_i$$

oder in Tensornotation

$$v_\alpha = \frac{1}{\rho_0} \sum_i \xi_{i,\alpha} f_i \quad (\text{Erstes Moment}). \quad (2.24)$$

Umgekehrt kann eine diskrete Gleichgewichtsverteilung F_i als Funktion der makroskopischen Variablen P, u, v, w mittels einer Variante der Maxwell-Verteilung berechnet werden. Unter der Annahme $Kn \rightarrow 0$, d.h. Kontinuumsströmung mit nur kleinen Abweichungen vom Gleichgewicht, sowie

$$Ma = v_\alpha / c_s \ll 1, \quad (2.25)$$

d.h. kleiner Machzahl und somit kleinen Strömungsgeschwindigkeiten bezogen auf die isotherme Schallgeschwindigkeit, wird die Maxwell-Verteilung um $v_\alpha = 0$ mit Hilfe einer Taylor-Reihe entwickelt.

Ausgangspunkt ist die in Kapitel 2.1.2 hergeleitete Maxwell-Verteilung (2.12), hier in Tensor-Notation und in der mit der Molekularmasse m erweiterten Variante:

$$F(\xi_\alpha, \rho, v_\alpha) = \frac{\rho}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\xi_\alpha - v_\alpha)^2}{2 c_s^2}\right)$$

Darin enthalten sind die druckabhängige Dichte $\rho = P/c_s^2$ und die kartesischen Komponenten der makroskopischen Geschwindigkeit v_α . Alle anderen auftretenden Größen sind konstant. Mit den partiellen Ableitungen

$$\frac{\partial F}{\partial v_\alpha} = \frac{\rho}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\xi_\alpha - v_\alpha)^2}{2 c_s^2}\right] \cdot \frac{\xi_\alpha - v_\alpha}{c_s^2}$$

und

$$\frac{\partial^2 F}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} = \frac{\rho}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\xi_\alpha - v_\alpha)^2}{2 c_s^2} \right] \cdot \left(\frac{(\xi_\alpha - v_\alpha)(\xi_\beta - v_\beta)}{c_s^4} - \frac{1}{c_s^2} \delta_{\alpha\beta} \right)$$

sowie dem Kronecker-Symbol $\delta_{\alpha\beta}$ für den Einheitstensor und der bis zum quadratischen Glied entwickelten Taylorreihe der Gleichgewichtsverteilung

$$f^{eq} = F(v_\alpha = 0) + \frac{\partial F}{\partial v_\alpha} \Big|_{v_\alpha=0} \cdot v_\alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \Big|_{v_{\alpha,\beta}=0} \cdot v_\alpha v_\beta + O(v_\alpha^3)$$

folgt für die diskrete Gleichgewichtsverteilung in jeder Geschwindigkeitsrichtung i

$$f_i^{eq}(\xi_{i,\alpha}, \rho, v_\alpha) = \rho t_{p,i} \left[1 + \frac{\xi_{i,\alpha} v_\alpha}{c_s^2} + \frac{v_\alpha v_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{\xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right]. \quad (2.26)$$

Die eingeklammerten Terme sind nach ihrer Größenordnung bezüglich der Mach-Zahl $Ma = v_\alpha / c_s$ sortiert:

$$\frac{\xi_{i,\alpha} v_\alpha}{c_s^2} = O(Ma) \quad (2.27)$$

$$\frac{v_\alpha v_\beta}{2c_s^2} = O(Ma^2) \quad (2.28)$$

Der von dem Verhältnis $\frac{\xi_{i,\alpha}^2}{c_s^2}$ und der isothermen Schallgeschwindigkeit c_s abhängige Vorfaktor wurde dabei zusammengefasst zu

$$t_{p,i} = \frac{1}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp \left(-\frac{\xi_\alpha^2}{2c_s^2} \right).$$

Der Suffix deutet bereits an, dass die Gewichtungsfaktoren $t_{p,i}$ vom anhand der in Abbildung 2.2 vorgestellten Betragsquadrat p und damit von den Geschwindigkeitsrichtungen i abhängt. Unter Ausnutzung der Stoßinvarianten, die analog zur kontinuierlichen Maxwell-Verteilung auch im diskreten Fall gelten müssen, erhält man in Übereinstimmung mit den Abschätzungen (2.27) und (2.28) die Beziehung

$$\xi_s^2 = 3 c_s^2 \quad (2.29)$$

sowie $t_{p,i}$, das nur noch abhängig von p und dem gewählten diskreten Geschwindigkeitsraum (z.B. D2Q9, D3Q15) ist. Die Zahlenwerte für $t_{p,i}$ sind in Tabelle 2.2 aufgelistet. Eine ausführliche Herleitung wird in Anhang B.2 diskutiert.

2.3.3 Konsistenz

Aus dem diskreten LBGK-Modell und der vereinfachten, diskreten Maxwell-Verteilung ist nicht ohne weiteres ersichtlich, welches physikalische System mit welcher Genauigkeit beschrieben wird. Analog zum kontinuierlichen BGK-Modell kann jedoch auch

	p	t_{p,i}
D2Q9	0, 1, 2	4/9, 1/9, 1/36
D3Q15	0, 1, 3	2/9, 1/9, 1/72

Tabelle 2.2: Gewichtungsfaktor $t_{p,i}$

die beschriebene, diskrete Form mit Hilfe der Chapman-Enskog-Entwicklung analysiert werden [6].

Es wird zunächst eine Normierung der LBGK-Gleichung (2.20) durchgeführt, um die Größenordnung der einzelnen Terme in den folgenden Betrachtungen auswerten zu können. Es ergeben sich folgende dimensionslose Variablen:

$$\begin{aligned} x_\alpha &= \frac{x_\alpha^*}{L^*} & t &= \frac{t^* \xi_s^*}{L^*} & e_{i,\alpha} &= \frac{\xi_{i,\alpha}^*}{\xi_s^*} = \frac{\delta x_{i,\alpha}}{\delta t} \\ f &= \frac{f^*}{f_0^*} = \frac{f^*}{\rho_{\text{ref}}^*} & \omega &= \frac{\omega^* L^*}{\xi_s^*} \end{aligned} \quad (2.30)$$

Die dimensionbehafteten Größen sind zur Unterscheidung mit einem Stern * markiert. Für den Relaxationfaktor $\Omega = \omega \delta t$ ergibt sich dadurch die Größenabschätzung

$$\Omega = \frac{\omega^* L^*}{\xi_s^*} \frac{\xi_s^* \delta t^*}{L^*} = \omega^* \delta t^* = O(1)$$

Die dimensionslose LBGK-Gleichung lautet damit

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega (f_i^{eq}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t)) \quad (2.31)$$

oder in Tensornotation

$$f_i(x_\alpha + e_{i,\alpha} \delta t, t + \delta t) = f_i(x_\alpha, t) + \Omega (f_i^{eq}(x_\alpha, t) - f_i(x_\alpha, t)). \quad (2.32)$$

Durch Momentenbildung können außerdem die normierten makroskopischen Variablen Dichte, Geschwindigkeiten und Druck ermittelt werden:

$$\begin{aligned} \rho^* &= \sum_i f_i^* = \sum_i \rho_{\text{ref}}^* f_i = \rho_{\text{ref}}^* \rho \\ \rho^* v_\alpha^* &= \sum_i \xi_{i,\alpha}^* f_i^* = \sum_i \xi_s^* \rho_{\text{ref}}^* \xi_{i,\alpha} f_i = \xi_s^* \rho_{\text{ref}}^* \rho v_\alpha \\ \Rightarrow v_\alpha^* &= \xi_s^* v_\alpha \\ P^* &= c_s^{*2} \sum_i f_i^* = c_s^{*2} \sum_i \rho_{\text{ref}}^* f_i = \frac{c_s^{*2}}{c_s^2} \rho_{\text{ref}}^* P = \xi_s^{*2} \rho_{\text{ref}}^* P. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Im nächsten Schritt wird die diskrete Verteilungsfunktion f_i nach Chapman und Enskog aufgespalten in einen Gleichgewichts- und einen Nichtgleichgewichtsanteil:

$$f_i = f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} \quad (2.34)$$

Der Term $\epsilon f_i^{(1)}$ bezeichnet hier eine Störverteilung, die die Abweichung vom Gleichgewichtszustand f_i^{eq} beschreibt. Es wird angenommen, dass diese Abweichung klein bleibt und in der Größenordnung der diskreten Knudsenzahl liegt. Diese ist unter der Annahme kleiner Orts- und Zeitschrittweiten wie folgt definiert:

$$\epsilon = \delta t = \delta x_\alpha \ll 1 \quad (\text{diskrete Knudsenzahl}).$$

Für den eigentlichen Konsistenznachweis wird f in einer Taylorreihe um einen Punkt (x_α, t) entwickelt:

$$\begin{aligned} f_i(x_\alpha + \delta t e_{i,\alpha}, t + \delta t) &= f_i(\vec{x}, t) + \delta t \frac{\partial f_i}{\partial t} + \delta t e_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} + \\ &\delta t \left(\delta t e_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t \partial x_\alpha} \right) + \frac{\delta t^2}{2} e_{i,\alpha} e_{i,\beta} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} + O(\delta t^3). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Einsetzen in die dimensionslose LBGK-Gleichung (2.32) und anschließende Division durch δt liefert die folgende partielle Differenzialgleichung für $f_i(\vec{x}, t)$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_i}{\partial t} + e_{i,\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} - \frac{\Omega}{\delta t} (f_i^{eq} - f_i) = \\ &-\frac{\partial t}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t^2} + 2 e_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t \partial x_\alpha} + e_{i,\alpha} e_{i,\beta} \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right) + O(\delta t^2) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Hierbei wurde auch auf den Ausdruck $e_{i,\alpha} = \delta x_{i,\alpha} / \delta t$ zurückgegriffen.

Durch Einsetzen der Störverteilung aus (2.34) in die so entwickelte Transportgleichung ergibt sich unter Rückgriff auf die Beziehung $\delta t = \epsilon$:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t} + e_{i,\alpha} \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial x_\alpha} + \Omega f_i^{(1)} + \epsilon \left(\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t} + e_{i,\alpha} \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial x_\alpha} \right) = \\ &-\frac{\epsilon}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t^2} + 2 e_{i,\alpha} \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial t \partial x_\alpha} + e_{i,\alpha} e_{i,\beta} \frac{\partial^2 f_i^{eq}}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right) + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Diese Gleichung wird zunächst genutzt, um den Grenzübergang $\epsilon \rightarrow 0$ durchzuführen:

$$f_i^{(1)} = -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial f_i^{eq}}{\partial t} + e_{i,\alpha} \frac{\partial f_i^{eq}}{\partial x_\alpha} \right). \quad (2.38)$$

Diese Beziehung wird später noch benötigt, um höhere Momente der Störverteilung $f^{(1)}$ abzuschätzen.

Als nächstes wird ein Momentenabgleich für die Verteilungsfunktionen f und f^{eq} durchgeführt. Aus

$$\sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq} = \rho$$

und

$$\sum_i e_{i,\alpha} f_i = \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{eq} = \rho v_\alpha$$

ergeben sich für die Störverteilung $f^{(1)}$ die Momente

$$\sum_i f_i^{(1)} = 0 \quad (2.39)$$

und

$$\sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} = 0. \quad (2.40)$$

Auch diese Beziehungen werden im Verlaufe dieses Abschnitts noch benötigt.

Für die Bestimmung der makroskopischen Transportgleichungen werden die ersten beiden Momente der vollständigen entwickelten partiellen Differenzialgleichung (2.37) gebildet. Für das nullte Moment $\rho = \sum f_i$ erhält man wiederum mit $\delta t = \epsilon$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_i f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{eq} + \Omega \sum_i f_i^{(1)} + \epsilon \left(\frac{\partial}{\partial t} \sum_i f_i^{(1)} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} \right) = \\ -\frac{\epsilon}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_i f_i^{eq} + 2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial x_\alpha} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{eq} + \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{eq} \right) + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

Entsprechend der Definition der einzelnen Momente (Anhang C.2) für die Verteilungsfunktionen f_i^{eq} und $f_i^{(1)}$ erhält man die folgende Transportgleichung für die Dichte ρ :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial^2 \rho v_\alpha}{\partial t \partial x_\alpha} + \frac{\partial (\rho v_\alpha v_\beta + P \delta_{\alpha\beta})}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} \right) + O(\epsilon^2). \quad (2.41)$$

Analog kann das erste Moment durch Multiplikation mit der molekularen Geschwindigkeit $\rho v_\alpha = \sum \xi_{i,\alpha} f_i$ gebildet werden. Die Komponente α des Impulssatzes lautet damit

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{eq} + \Omega \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} + \\
& \epsilon \left(\frac{\partial}{\partial t} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{(1)} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} \right) = -\frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_i e_{i,\alpha} f_i^{eq} \right. \\
& \left. + 2 \frac{\partial^2}{\partial t \partial x_\beta} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{eq} + \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\gamma} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{eq} \right) + O(\epsilon^2) \quad (2.42)
\end{aligned}$$

Das erste Moment der Störverteilung $\sum e_{i,\alpha} f_i^{(1)} = 0$ verschwindet (vergl. 2.40). Das zweite Moment $\sum e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)}$ hingegen liefert einen Beitrag zum Spannungstensor. Mit Gleichung (2.38) gilt

$$\sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} f_i^{eq} + \frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{eq} \right)$$

Der rechte Summand in der Klammer kann mit Hilfe der Definition für die diskrete Maxwell-Verteilung (2.26) ausgewertet werden. Für ihn gilt nach [20]

$$\frac{\partial}{\partial x_\gamma} \sum_i e_{i,\alpha} e_{i,\beta} e_{i,\gamma} f_i^{eq} = \rho_0 c_s^2 \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} \right). \quad (2.43)$$

Analog dazu kann auch der letzte Summand aus Gleichung (2.42) behandelt werden.

Mit Hilfe der Annahme einer nahezu konstanten Dichte kann die Vereinfachung

$$\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0$$

eingeführt werden. Daraus ergeben sich die Gleichungen für die Impulserhaltung in molekularen Skalen zu

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho v_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho v_\alpha v_\beta + P \delta_{\alpha\beta}) = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \eta \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \\
& - \frac{\epsilon}{2} \left(2 \frac{\partial^2 \rho v_\alpha}{\partial t^2} - \left(\frac{1}{\Omega} - 1 \right) \frac{\partial^2}{\partial t \partial x_\alpha} (\rho v_\alpha v_\beta + P \delta_{\alpha\beta}) \right) + O(\epsilon^2) \quad (2.44)
\end{aligned}$$

Dabei wurde bereits die dynamische Zähigkeit

$$\eta = \rho_0 \frac{\epsilon c_s^2}{2} \left(\frac{2}{\Omega} - 1 \right) \quad (2.45)$$

eingesetzt.

2.3.4 Betrachtung auf makroskopischen Skalen

Bei der Ausführung des LBGK-Algorithmus werden, wie bei der Konsistenzuntersuchung im vorangehenden Abschnitt gezeigt, die Transportgleichungen für Masse (2.41) und Impuls (2.44) gelöst. Die Übereinstimmung mit den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen ist nicht ohne weiteres ersichtlich. Der Grund dafür liegt in der für den Konsistenznachweis vorgenommenen Normierung (2.30) und (2.33), die sich von der bekannten dimensionslosen Form der Navier-Stokes in einigen Punkten unterscheidet. Um die Übereinstimmung nachzuweisen, wird eine Umskalierung vorgenommen, mit dem Ziel, alle dimensionslosen makroskopischen Transportgrößen auf eine Größenordnung von $O(1)$ zu bringen.

Dazu werden die transportierten Variablen genauer betrachtet und ihre Größenordnung abgeschätzt.

- **Die Geschwindigkeiten \mathbf{v}_α .** Die Größenordnung der Geschwindigkeiten ist durch die vorausgesetzten kleinen Machzahlen (Gleichung 2.25) bestimmt. Für $Ma \ll 1$ und normierter Molekulargeschwindigkeit $\xi_s = 1$ gilt daher $v_\alpha \ll 1$ wegen (2.33).

Mit Einführung einer künstlichen Machzahl

$$m = u_0/\xi_s \ll 1, \quad (2.46)$$

wobei u_0 eine typische dimensionslose makroskopische Geschwindigkeit bezeichnet, kann die auf Größenordnung $O(1)$ normierte Geschwindigkeit

$$v'_\alpha = v_\alpha/m \quad (2.47)$$

definiert werden.

- **Strömungszeit t .** In niederfrequenten Strömungen gilt in einem weiten Bereich für die Strouhal-Zahl

$$Sr = \frac{L u_0}{\tau} = O(1),$$

wobei L hier eine normierte makroskopische Länge der Ordnung $O(1)$ bezeichnet. Mit $u_0 = O(m)$ aus (2.46) folgt daraus ebenfalls $\tau = O(m)$. Für die Normierung wird daher eine dimensionslose Zeit bzw. die Zeitableitung

$$\tau' = (1/m) \tau \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial}{\partial t} = m \cdot \frac{\partial}{\partial t'} \quad (2.48)$$

eingeführt.

- **Die kinematische Viskosität ν .** Mit Hilfe der Definition $\nu = \eta/\rho_0$ und der Beziehung (2.45) sowie $O(\epsilon) = O(m)$ folgt sofort $\nu = O(m)$. Die normierte Vis-

kosität ν' ergibt sich damit zu

$$\nu' = \nu/m. \quad (2.49)$$

- **Der Druck P .** Der Druck kann aufgespalten werden in einen thermodynamischen sowie einen hydrodynamischen Anteil:

$$P = P_t + P_h.$$

Der thermodynamische Anteil wird als konstant angenommen und kann über die Zustandsgleichung $P_t = \rho_0 R T$ ausgedrückt werden. Dieser Anteil bleibt in den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen ohnehin unberücksichtigt, da er auch räumlich konstant ist. d.h. $\frac{\partial P_t}{\partial x_\alpha} = 0$.

Für den hydrodynamischen Anteil P_h gilt aufgrund der Normierung (2.30) die Beziehung

$$P_h = \frac{P^*}{\rho^* \xi_s^{*2}}$$

und damit

$$P_h = O(m^2).$$

Der normierte hydrodynamische Druck P' kann damit definiert werden als

$$P' = P_h/m^2. \quad (2.50)$$

Mit der Annahme eines inkompressiblen Fluids $\rho \approx \rho_0 = \text{const.}$, den Definitionen (2.47) bis (2.50) sowie der Beziehung $O(\epsilon) = O(m) \ll 1$ können die Massen- und Impulserhaltungsgleichungen (2.41) und (2.44) umgeformt werden. Es wird hier auf weitere Details verzichtet und statt dessen auf die Literatur [20] verwiesen.

Die Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial v'_\alpha}{\partial x_\alpha} = O(\epsilon \cdot m), \quad (2.51)$$

der Impulssatz

$$\frac{\partial \rho_0 v'_\alpha}{\partial t'} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho_0 v'_\alpha v'_\beta + P' \delta_{\alpha\beta}) = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \nu' \rho_0 \left(\frac{v'_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{v'_\beta}{\partial x_\alpha} \right) + O(\epsilon \cdot m). \quad (2.52)$$

Dieses Gleichungssystem entspricht den inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen. Die Größenordnung des Abbruchfehlers beträgt damit für beide Gleichungen $O(\epsilon \cdot m)$. Mit $\epsilon \ll 1$ und $m \ll 1$ ergibt sich damit ein Verfahren, das zweiter Ordnung in Raum und Zeit genau ist.

2.3.5 Der Basisalgorithmus

Die Basisvariante des LBGK-Algorithmus ist relativ einfach zu implementieren. Ausgangspunkt ist hierbei ein kartesisches Gitter, entweder in 2-D oder in 3-D. Die Art der Speicherung und der Zugriff auf Gitterpunkte ist dabei zunächst nebensächlich. Abbildung 2.2 illustriert die Punktnachbarschaften, die entweder durch Berechnung oder durch explizite Speicherung bekannt sein müssen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden ausschließlich die abgebildeten Konfigurationen D2Q9 (2-D; vier kartesische, vier diagonale Nachbarschaften) und D3Q15 (3-D; sechs kartesische Nachbarschaften, acht in Richtung der Raumdiagonalen) verwendet.

Folgende Voraussetzung müssen für die Anwendung des LBGK-Algorithmus erfüllt werden:

- Wahl eines diskreten Geschwindigkeitsraums (z.B. D2Q9, D3Q15) und Diskretisierung des Integrationsgebietes mit einem kartesisch-äquidistanten Rechengitter. Je nach Aufbau der Datenstruktur müssen die benötigten Nachbarschaftsbeziehungen eventuell explizit gespeichert werden.
- Festlegung der Stoffkenngrößen ρ_0 und η bzw. ν
- Berechnung der thermischen Geschwindigkeit c_s aus der Machzahl und einer typischen Strömungsgeschwindigkeit u_∞ mit Hilfe der Beziehung

$$Ma = \frac{u_\infty}{c_s}$$

- Bestimmung der skalaren molekularen Geschwindigkeit $\xi_s = \sqrt{3}c_s$ (Gleichung 2.29) und Berechnung des Zeitschritts $\delta t = \delta x_\alpha / \xi_s$
- Berechnung des Relaxationsfaktors

$$\Omega = \delta t \frac{c_s^2}{\nu + c_s^2 \delta t / 2} \quad (2.53)$$

Dieser Parameter muss sich in den Grenzen $0 < \Omega < 2$ bewegen, damit das Verfahren stabil bleibt. Für hohe Reynolds-Zahlen $Re \gg 1$ nähert sich der Wert der Stabilitätsgrenze $\Omega \rightarrow 2$. In diesem Falle muss das Verfahren künstlich stabilisiert werden, z.B. durch Wahl von $\Omega \approx 2 - \epsilon$ oder durch lokale Anwendung eines Dämpfungsterms.

Alle weiteren Schritte zur Durchführung der LBGK-Methode sind in Algorithmus 1 zusammengefasst.

Algorithmus 1 LBGK-Basisalgorithmus

Require: Sei n der aktuelle Zeitschritt, N_t die Anzahl der notwendigen Zeitschritte, um eine Simulationszeit $t_{max} = \delta t \cdot N_t$ abzudecken. Sei i eine diskrete Geschwindigkeitsrichtung, N_ξ die Zahl der Geschwindigkeitsrichtungen im diskreten Geschwindigkeitsraum (9 in 2-D, 15 in 3-D). Sei j der Schleifenindex des aktuell betrachteten Punktes und N_p die Anzahl aller Punkte im Rechengebiet. Ferner wird der in Richtung i liegende Nachbarpunkt des Punktes j mit $j_{nb}(i, j)$ bezeichnet.

for $j = 0$ to $N_p - 1$ **do**

Anfangsbedingung. Setzen des Punktes j entsprechend der gewünschten Anfangsbedingung. Diese wird häufig mit Hilfe der Maxwell-Verteilung ermittelt.

end for

for $n = 0$ to $N_t - 1$ **do**

for $j = 0$ to $N_p - 1$ **do**

Randbedingung. Falls j ein Randpunkt ist, setze die entsprechende Randbedingung. Mehr dazu in Abschnitt 2.4.

end for

for $j = 0$ to $N_p - 1$ **do**

Kollisionsschritt. Gemäß Gleichung (2.21) werden die Postkollisionswerte \tilde{f}_i^n an Punkt j für alle $i \in [0, N_\xi - 1]$ berechnet. Zur Bestimmung der Gleichgewichtsverteilung $f_i^{eq, n}$ werden die Momente P , u , v und w benötigt. Diese werden zuvor aus der Verteilungsfunktion f_i^n mit Hilfe der Gleichungen (2.23) und (2.24) berechnet. Der Kollisionsschritt ist eine reine Punktoperation.

end for

for $j = 0$ to $N_p - 1$ **do**

Transportschritt. Gemäß Gleichung (2.22) werden die einzelnen Komponenten der Postkollisionsverteilung \tilde{f}_i^n auf ihre jeweiligen Nachbarn verteilt, d.h. für den Punkt j und die Geschwindigkeitsrichtung $i \in [0, N_\xi - 1]$ gilt $f_i^{n+1}|_{j_{nb}(i, j)} = \tilde{f}_i^n|_j$. Der Transportschritt ist eine reine Kopieroperation.

end for

end for

Ende der Rechnung und Ergebnisausgabe

2.4 Randbedingungen

Die Formulierung der Randbedingungen ist unabhängig von Berechnungsverfahren auf nichtkonformen Gittern immer problematisch, da die Randpunkte des Gitters im Allgemeinen nicht auf den tatsächlichen Gebietsrändern liegen. Dadurch kommt es insbesondere bei Dirichlet'schen Randbedingungen zu Genauigkeitseinbußen. Für das LBGK-Verfahren wurden deshalb spezielle Varianten des Boundary Fittings entwickelt, z.B. in [9, 30].

2.4.1 Bounce-Back– und Gleichgewichtsrandbedingungen

Innerhalb des LBGK-Verfahrens macht sich der Einfluss der Randbedingungen im Transportschritt (2.22) bemerkbar, da jeder Punkt des Rechengebietes nur hier mit seinen Nachbarpunkten interagiert. Ist einer dieser Nachbarpunkte Teil des Gebietsrandes, muss dort zunächst eine physikalisch begründete Randbedingung definiert sein. Da innerhalb des Transportschrittes die Postkollisionsverteilung \tilde{f}_i propagiert wird, ist ein entsprechender Randwert $\tilde{f}_{b,i}$ mindestens für diejenige Geschwindigkeitsrichtung zu ermitteln, in die der benachbarte Feldpunkt liegt.

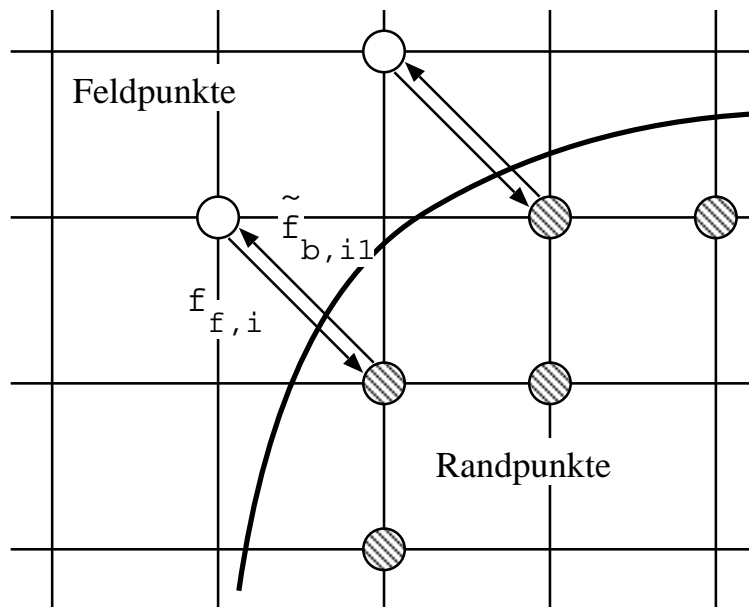


Abbildung 2.3: Randbedingungen nach dem Bounce-Back-Prinzip

Ein häufig genutzter Ansatz für die Formulierung von Haftbedingungen an festen Wänden ist das Bounce-Back-Prinzip. Es wird angenommen, dass ein Satz von Molekülen, der mit einer ideal rauhen Wand kollidiert, in die entgegengesetzte Richtung

reflektiert wird (Abbildung 2.3). Für den Randwert \tilde{f}_{b,i_1} gilt damit

$$\tilde{f}_{b,i_1} = \tilde{f}_{f,i} \quad (2.54)$$

wobei die Geschwindigkeitsrichtung i_1 entgegengesetzt zu Richtung i definiert ist, also $\vec{\xi}_i = -\vec{\xi}_{i_1}$. Die Verteilungsfunktion $\tilde{f}_{f,i}$ ist dem in Richtung i_1 benachbarten Feldpunkt zugeordnet.

Neben dem Bounce-Back-Verfahren ist es ebenso möglich, Randbedingungen über Gleichgewichtsverteilungen zu realisieren. Dabei werden die makroskopischen Größen Druck und Geschwindigkeit auf dem Randpunkt analog zu konventionellen Lösungsverfahren bestimmt (z.B. durch Extrapolation). Mit diesen Werten wird anschließend eine Gleichgewichtsverteilung berechnet (Gleichung 2.26).

In beiden Fällen bewegt sich der lokale Abbruchfehler in der Größenordnung des Abstandes Randpunkt - Gebietsrand ($O(\delta x)$), da sich die physikalisch exakten Randwerte an Stellen befinden, die im Allgemeinen nicht mit der Randgeometrie übereinstimmen.

2.4.2 Boundary Fitting–Randbedingungen

Aufgrund des endlichen Abstandes Randpunkt – Gebietsrand existiert im Falle der Randformulierungen 1. Ordnung auf letzterem im Allgemeinen eine Differenzgeschwindigkeit. Für eine exaktere Formulierung an den Gebietsrändern ist es notwendig, die Verteilungsfunktion auf dem Randpunkt geeignet zu extrapolieren.

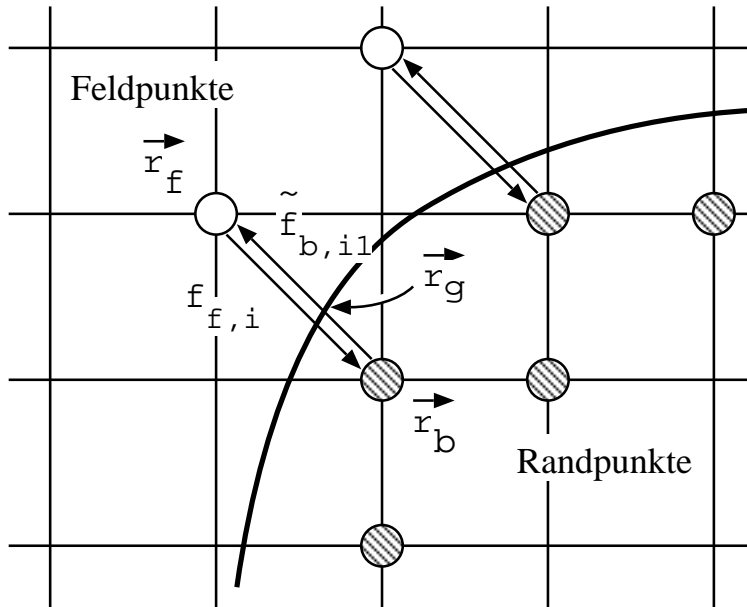


Abbildung 2.4: Boundary Fitting - Randbedingungen

Zunächst wird der dimensionslose Abstand Δ des randnächsten Fluidpunktes zum

Gebietsrand bestimmt:

$$\Delta = \frac{|\vec{r}_f - \vec{r}_g|}{|\vec{r}_f - \vec{r}_b|}$$

Der Punkt \vec{r}_g bezeichnet dabei den tatsächlichen Schnittpunkt des „Lattice links“ mit dem Gebietsrand (Abbildung 2.4). Die auf den Randpunkt extrapolierte Geschwindigkeit wird über

$$\vec{v}(\vec{r}_b) = \frac{\Delta - 1}{\Delta} \vec{v}(\vec{r}_f) + \frac{1}{\Delta} \vec{v}(\vec{r}_g) \quad (2.55)$$

ausgedrückt. Für den Fall einer festen Wand ist die Rutschgeschwindigkeit $\vec{v}(\vec{r}_g) = 0$. Ein ähnlicher Ansatz wird für die zu reflektierende Verteilungsfunktion \tilde{f}_{b,i_1} gemacht:

$$\tilde{f}_{b,i_1} = [(1 - \Omega) f_{f,i} + \Omega f_{f,i}^{eq}] (1 - \omega_i) + [a_1 f_{b,i}^{eq} + a_2 f_{f,i}^{eq}] \omega_i - 2 t_{p,i} \frac{v_{g,\alpha} \xi_{i,\alpha}}{c_s^2}$$

Der letzte Summand berücksichtigt die Rutschgeschwindigkeit auf der Wand (zu überprüfen anhand von Bildung des ersten Momentes). Die Gleichgewichtsverteilung $f_{b,i}^{eq}$ auf dem Randpunkt wird mit Hilfe von extrapolierten Momenten bestimmt:

$$f_{b,i}^{eq} = t_{p,i} \frac{P_f}{c_s^2} \left[1 + \frac{\xi_{i,\alpha} v_{b,\alpha}}{c_s^2} + \frac{v_{f,\alpha} v_{f,\beta}}{2c_s^2} \left(\frac{\xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right].$$

Die Bestimmung des Gewichtungsfaktors ω_i wird in [9] ausführlich beschrieben. Es ergeben sich folgende Ausdrücke für die noch unbekannten Variablen:

$$\omega_i = \Omega (2\Delta - 1), \quad \alpha_1 = 1, \quad \alpha_2 = 0 \quad \text{für } \Delta \geq 0.5 \quad (2.56)$$

$$\omega_i = \Omega \frac{(2\Delta - 1)}{1 - \Omega}, \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = 1 \quad \text{für } \Delta < 0.5 \quad (2.57)$$

2.5 Erweiterungen der LBGK-Methode

Die in Abschnitt 2.3.5 vorgestellte Basisvariante des inkompressiblen LBGK-Algorithmus wurde in zahlreichen Arbeiten erweitert und mit anderen Transportmodellen gekoppelt, z.B. in [10, 21]. Der Autor nutzt nur eine kleine, im Verlauf dieses Abschnitts beschriebene Teilmenge der publizierten Methoden.

2.5.1 Lokale Gitterverfeinerung

Lokale Gitterverfeinerung wird in Bereichen angewendet, in denen mit großen Gradienten in der Lösung gerechnet werden muss (z.B. Grenzschichten). Dadurch kann die Anzahl der Rechenpunkte in einem lokal begrenzten Gebiet gesteigert werden, ohne solche Bereiche, in denen die Strömung vergleichsweise uniform ist, ebenfalls stärker aufzulösen (Abbildung 2.5).

Aufgrund der konstanten kinematischen Viskosität und der in Abschnitt 2.3 vorge-

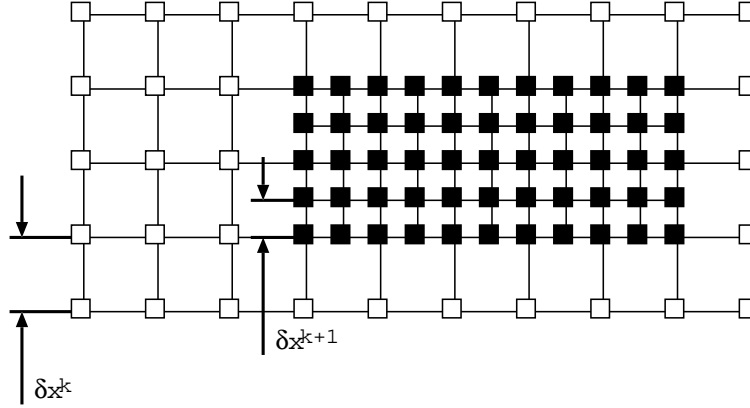


Abbildung 2.5: Beispiel für ein lokal verfeinertes Gitter in 2-D

stellten Definition der konstanten isothermen Schallgeschwindigkeit $c_s = \xi_s/\sqrt{3}$ sind die Zeitschrittweite und der Relaxationsparameter Ω abhängig von der Wahl der Gitterschrittweite (vergl. 2.19). Daher wird für jede Verfeinerungsstufe (Gebiet konstanter Gitterschrittweite δx^k) ein eigener Zeitschritt δt^k und ein lokaler Relaxationsparameter

$$\Omega^k = \delta t^k \frac{c_s^2}{\nu + c_s^2 \delta t^k / 2}$$

benötigt. Für ein lokal verfeinertes Gebiet mit Gitterschrittweite $\delta x^{k+1} = \delta x^k / m$ bei einem Verfeinerungsfaktor m ergibt sich der reduzierte Zeitschritt $\delta t^{k+1} = \delta t^k / m$. Durch die hier genutzten, balancierten Octree-Gitter (Kapitel 3) gilt dabei stets $m = 2$.

Betrachtet man die dimensionsbehaftete Chapman-Enskog-Entwicklung

$$f = F + \delta t f^{(1)} + \dots \quad (2.58)$$

für das BGK-Modell, so erhält man mit Gleichung (2.13) und dem Grenzübergang $\delta t \rightarrow 0$ die Beziehung

$$f^{(1)} = -\frac{1}{\Omega} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right) \quad (2.59)$$

für die Störverteilung $f^{(1)}$. Im diskreten Fall kann die Gleichung (2.20) wiederum mit Hilfe der Chapman-Enskog-Entwicklung (2.58) umgeformt werden zu

$$f_i^{n+1} = f_{i-1}^{eq,n} + \delta t (1 - \Omega) f_{i-1}^{(1)n}.$$

Die Störverteilung wird mit Hilfe von Gleichung (2.59) ersetzt. Um der Forderung nach stetigen makroskopischen Strömungsgrößen zu genügen, wird beim Übergang in eine

Verfeinerungszone gefordert, dass

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right)^k = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \right)^{k+1}$$

und damit

$$(f_i^{n+1} - f_i^{eq,n})^k \frac{\Omega^k}{1 - \Omega^k} \frac{1}{\delta t^k} = (f_i^{n+1} - f_i^{eq,n})^{k+1} \frac{\Omega^{k+1}}{1 - \Omega^{k+1}} \frac{1}{\delta t^{k+1}}$$

gilt. Durch einsetzen des Kollisionsschritts (2.21) ergeben sich die Umskalierungsvorschriften

$$\tilde{f}_i^k = f_i^{eq,k+1} + \left(\tilde{f}_i^{k+1} - f_i^{eq,k+1} \right) \cdot \frac{(1 - \Omega^k) \Omega^{k+1} m}{\Omega^k (1 - \Omega^{k+1})} \quad (2.60)$$

und

$$\tilde{f}_i^{k+1} = f_i^{eq,k} + \left(\tilde{f}_i^k - f_i^{eq,k} \right) \cdot \frac{(1 - \Omega^{k+1}) \Omega^k}{\Omega^{k+1} (1 - \Omega^k) m} \quad (2.61)$$

jeweils an der gleichen Ortskoordinate und zum festen Zeitpunkt n .

Für eine zeitgenaue Implementierung müssen zu jedem Zeitschritt auf dem Teilgitter mit Schrittweite δx^k jeweils m Schritte in der lokal verfeinerten Zone δx^{k+1} erfolgen. Die Umskalierungsvorschriften (2.60) und (2.61) können im Transportschritt untergebracht werden. Vereinfachend ist dabei die Tatsache, dass die diskrete Maxwell-Verteilung f_i^{eq} nur mit gitterunabhängigen, makroskopischen Größen gebildet wird, sodass gilt $f_i^{eq,k} = f_i^{eq,k+1}$.

2.5.2 Anwendung lokaler Dämpfungsterme

Für hohe Reynoldszahlen $Re \gg 1$ strebt der Relaxationsparameter des LBGK-Verfahrens gegen die Stabilitätsgrenze $\Omega \rightarrow 2$. Treten in der Lösung zusätzlich hohe Gradienten auf, z.B. im Bereich von Scherschichten, wird das Verfahren instabil und muss abgebrochen werden.

Die Ursache für dieses Verhalten wird in der Neumann'schen Stabilitätsanalyse des LBGK-Verfahrens ersichtlich. Hier zeigt sich, dass das Iterationsschema des Verfahrens nur für $\Omega \leq 2$ stabil ist (Anhang B.1). Die Erfahrungen mit konventionellen Navier-Stokes-Lösern zeigt, dass in einem solchen Fall zusätzliche Dämpfungsterme erforderlich sind, um das Verfahren zu stabilisieren (numerische Dämpfung [19]). Dieses Phänomen steht im engen Zusammenhang mit Problemen bei der Simulation von turbulenten Strömungen.

Im Rahmen des LBGK-Verfahrens kann eine numerische Dämpfung durch zusätzliche Viskosität ν' realisiert werden. Diese wird mit der physikalisch wirksamen kinematischen Viskosität zusammengefasst zu

$$\nu^{num} = \nu + \nu'$$

Zur Berechnung dieser zusätzlichen künstlichen Viskosität wird ein Ansatz nach [43] genutzt. Dabei wird der Tatsache Rechnung getragen, dass eine Strömung mit vergleichsweise hohen Reynolds-Zahlen sehr kleine Strukturen ausbildet. Die kleinsten von der Kontinuumsstheorie erfassten Strukturen sind Wirbel (engl. *eddies*), deren Durchmesser, die Kolmogorov-Länge l_K , durch

$$Re \sim \left(\frac{L}{l_K} \right)^{4/3}$$

abgeschätzt werden kann, wobei L eine charakteristische makroskopische Abmessung bezeichnet. Im Extremfall einer voll ausgebildeten, turbulenten Strömungen wird das Spektrum der auftretenden Wirbel so groß, dass der mittleren, „geordneten“ Fluidbewegung eine chaotische Bewegung überlagert wird. Können diese kleinsten Wirbel aufgrund von Kapazitätsgrenzen heutiger Rechner nicht mehr aufgelöst werden, muss ihre Wirkungsweise durch ein sogenanntes *“subgrid-scale model”* berücksichtigt werden.

Ähnlich der kinematischen Viskosität liefern die Kolmogorov-Wirbel einen Beitrag zum Impulsaustausch innerhalb einer Strömung. In Analogie zur Definition der Schubspannung

$$\tau = \nu \rho \frac{\partial u}{\partial y}$$

wird die formal ähnliche Beziehung

$$\tau_t = \nu' \rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial y}$$

angesetzt, wobei ν' die sog. Wirbelviskosität und τ_t eine „turbulente“ Schubspannung darstellt [44]. Die Geschwindigkeit \bar{u} berücksichtigt nur die mittlere Fluidbewegung. Diese Beziehung wird als Boussinesq-Ansatz bezeichnet. Nach Prandtl kann die Wirbelviskosität über die Mischungswegformel

$$\nu' = l_M^2 \left| \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right|$$

ausgedrückt werden. Der Mischungsweg l_M bezeichnet dabei diejenige Weglänge, die eine turbulent überlagerte Scherströmung benötigt, um einen vollständigen Ausgleich zwischen den beiden Schichten der Strömung herzustellen.

In den hier betrachteten Problemstellungen der Naseninnenhöhle herrscht zwar keine Turbulenz im eigentlichen Sinne. Trotzdem kann der hier vorgestellte Ansatz herangezogen werden, um die Berechnungen bei Bedarf zu stabilisieren. Die zusätzliche, künstliche Viskosität ν' wird ausgedrückt als

$$\nu' = (C_s \delta)^2 |S_{\alpha\beta}|.$$

Die Variable δ bezeichnet die lokale Gitterschrittweite. Die Konstante C_s ist stark problemabhängig. Eine typische Wahl für interne Strömungen ist jedoch ein Wert von $C_s = 0.065$. Damit besitzt ν' eine Größenordnung von $O(\delta^2)$. Die Größe $|S_{\alpha\beta}|$ bezeichnet eine beliebige Norm des Schertensors

$$S_{\alpha\beta} = \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha}.$$

Der Ansatz erhöht die effektive Viskosität in Gebieten großer Schubspannungen und bringt damit zusätzliche Dämpfungsanteile in das Lösungsverfahren ein. Ein ähnlicher Ansatz ist häufig in sogenannten Large-eddy- oder Grobstruktursimulationen (z.B. [24]) zu finden.

Kapitel 3

Geometrieverarbeitung und Gittererzeugung

3.1 Handhabung von Geometriedaten

Dieses Kapitel befasst sich mit der Struktur und Erzeugung der in dieser Arbeit genutzten dreidimensionalen Rechengitter. Ausgangspunkt ist dabei die Form der Beschreibung, in der die durchströmte Geometrie für ein Vernetzungsverfahren zur Verfügung gestellt wird. Alleine die Art und Weise der Abbildung von geometrischen Daten im Rechner ist ein komplexes Thema, dessen ausführliche Behandlung den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Aus diesem Grunde wird in diesem Abschnitt nur kurz auf zwei Formen der Geometrirepräsentation eingegangen.

3.1.1 Boundary Representation

Die Beschreibung von Geometrien für die Strömungsberechnung kann auf zwei Arten erfolgen. Die erste ist die stückweise Beschreibung der Körpergrenze durch analytische Flächenstücke. Die gängige Bezeichnung für diese Art der Geometriebeschreibung ist **BRep** (Boundary Representation). Diese Beschreibung hat sich in den Ingenieurwissenschaften für die Bearbeitung von technischen Geometrien durchgesetzt und als sehr leistungsfähig erwiesen. Für die Abbildung von physiologischen Geometrien wie der Nasenhaupthöhle ist sie jedoch weniger geeignet [31].

Die Beschreibung solcher Geometrien über BRep ist sehr komplex und erfordert außerordentlich viel Entwicklungsarbeit und -aufwand. Glücklicherweise existieren bereits sehr ausgereifte Softwarebibliotheken zur Verarbeitung von BRep-Geometrien wie z.B. der offene Geometrikern OpenCascade [34], auf den im Rahmen dieser Arbeit zurückgegriffen wurde.

3.1.2 Isogrenzfläche

Die zweite und für diese Arbeit relevantere Art der Geometriebeschreibung erfolgt über ein dreidimensionales Graustufenbild, wie es vom Computertomographen- oder Magnetresonanztomographen geliefert wird. Die Körpergrenzfläche wird identifiziert mit einem definierten Grauwert, dessen Isofläche als Eingangsdatum für den Volumengittergenerator verwendet wird.

Auch diese einfache Art der Geometrieprepräsentation erfordert jedoch erheblichen Entwicklungsaufwand insbesondere im Bereich der digitalen Bildverarbeitung, der nicht Thema dieser Arbeit sein kann. Dennoch werden einige grundsätzliche Techniken zur Aufbereitung solcher Datensätze beschrieben und insbesondere diejenigen Arbeitsschritte aufgezeigt, die nötig sind, um aus dem Datensatz ein funktionsfähiges Rechengitter zu gewinnen.

3.2 Generierung von Oberflächengittern

Die Generierung von Volumengittern erfordert die Kenntnis der zu vernetzenden Kontur. Diese Kontur wird in vielen Fällen als topologisch geschlossene Oberflächentriangulierung beschrieben. Es existieren verschiedenste Ansätze zur Erzeugung einer solchen Triangulierung. In dieser Arbeit wurden verschiedene Verfahren realisiert, auf die im folgenden eingegangen werden soll.

3.2.1 Oberflächentriangulierung von BRep-Körpern

Die unstrukturierte Oberflächentriangulierung beliebiger BRep-Körper ist heutzutage eine Standardfunktion jeder kommerziellen CFD-Plattform. Auch in der Literatur finden sich viele verschiedene Ansätze [5]. In den meisten Fällen wird eine Triangulierung erzeugt, die dem bekannten Delaunay-Kriterium genügt. Dieser Ansatz wird auch oft bei der Erzeugung zweidimensionaler Triangulierungen verwendet (z.B. [17, 40, 45]). Dennoch weist das Problem der Oberflächentriangulierung von BRep-Körpern einige entscheidende Schwierigkeiten auf, die eine Implementierung sowohl für diese Arbeit als auch im Hinblick auf zukünftige am Institut für Verbrennung und Gasdynamik durchzuführende Projekte rechtfertigen.

Ausgangspunkt ist ein durch eine analytische, stetige Flächenfunktion und einem Satz von Begrenzungskanten eindeutig beschriebenes Flächenstück (Abbildung 3.1). Die Flächenfunktion wird im weiteren Verlauf des Kapitels mit

$$\vec{x} = \vec{p}(s, t) \tag{3.1}$$

bezeichnet. Der Parameterraum der Fläche wird mit den Koordinaten s und t identifiziert. Mit Hilfe von OpenCascade – Bibliotheksfunktionen kann eine Triangulierung erstellt werden, die auf dem Rising-Bubble-Verfahren basiert [45] und die analytische

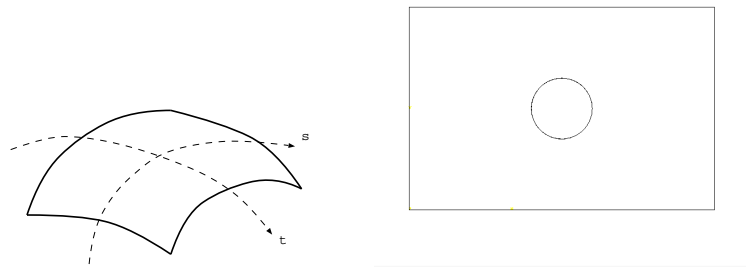


Abbildung 3.1: Analytische Oberfläche eines BRep-Körpers

Oberfläche mit einer vorzugebenden Genauigkeit annähert (Abbildung 3.2). Diese Triangulierung besteht aus einer Punktliste mit den zugehörigen Koordinaten im Parameterraum als auch in 3-D sowie aus einer Dreiecksliste mit je drei Verweisen als Dreieckspunkte. Zudem ist es zweckmäßig, eine Kantenliste vorzuhalten, in der sowohl die Kantenendpunkte als auch die angrenzenden Dreiecke abgelegt werden.

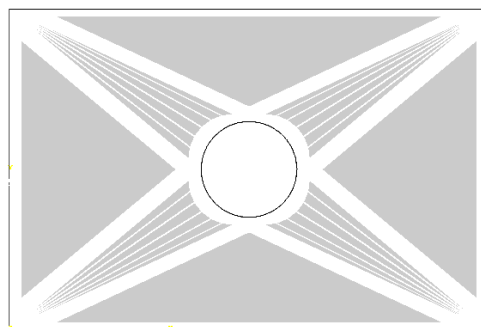


Abbildung 3.2: Oberflächentriangulierung nach dem Rising-Bubble-Verfahren

Diese Triangulierung ist nicht gut geeignet für die Weitergabe an einen Volumennetzgenerator, da die hier erzeugten Dreiecke sehr spitze Winkel besitzen und ihre Größe stark variiert. Beides sind schlechte Voraussetzungen sowohl für oberflächenkonforme als auch für nichtkonforme Gitter (hier können numerische Schwierigkeiten bei den notwendigerweise auszuführenden Schnittpunktberechnungen auftreten). Somit ist eine weitergehende Behandlung der Triangulierung erforderlich. In den genannten Literaturquellen wird dieser Arbeitsschritt als Gitteroptimierung bezeichnet. Darauf wird im Folgenden eingegangen.

a) Dreiecksverfeinerung

Zur lokalen Erhöhung der Netzdichte ist das Einfügen von zusätzlichen Knotenpunkten erforderlich. Um die topologische Geschlossenheit der Triangulierung zu erhalten, müssen dabei gleichfalls ein oder mehrere Dreiecke und die dazugehörigen Kanten modifiziert werden.

Es wurden zwei Arten von Dreiecksverfeinerungen implementiert: Schwerpunktverfeinerung und Kantenteilung (Abbildung 3.3). Die Kantenteilung wird dabei ausschließlich zur Verfeinerung der Gebietsränder genutzt.

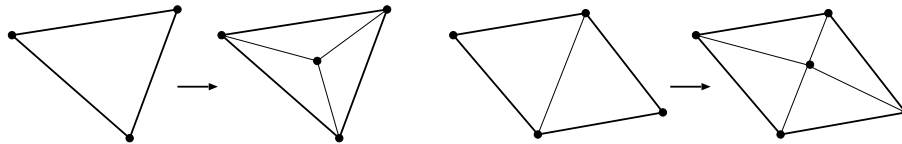


Abbildung 3.3: Lokale Dreiecksverfeinerung durch Einsetzen eines neuen Punktes auf der Fläche (links) und durch Teilung entlang einer Netzkante (rechts)

Es ist zu beachten, dass die Punkteinfügung im Parameterraum der Fläche durchgeführt wird. Der zugehörige Raumpunkt \vec{P} muss nicht notwendigerweise auf der durch das zu verfeinernde Dreieck aufgespannten Fläche liegen, sondern wird anhand der Oberflächengleichung (3.1) ermittelt. Aus diesem Grunde ist erforderlich, zu prüfen, ob die Normalenprojektion \vec{P}' des Punktes \vec{P} auf das Dreieck innerhalb dessen Kantenbegrenzung liegt (Abbildung 3.4). Nur dann ist die Formierung von nichtnegativen Dreieckselementen garantiert.

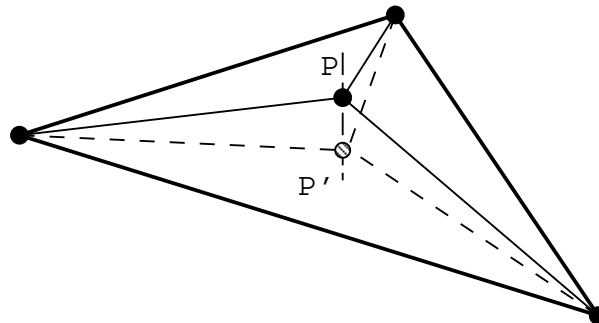


Abbildung 3.4: Projektion des eingefügten Punktes auf die Dreiecksfläche

b) Kantentausch

Der Kantentausch ist eine notwendige Operation zur Erfüllung des Delaunay-Kriteriums. Dieses besagt in 2-D, dass der Umkreis eines Dreiecks keine weiteren Kno-

tenpunkte der Triangulierung beinhalten darf. Eine Triangulierung, die dieser Voraussetzung genügt, zeichnet sich durch gleichmäßige Dreiecke mit verhältnismäßig stumpfen Winkeln aus.

Die globale Überprüfung des Delaunay-Kriteriums ist sehr aufwändig und glücklicherweise unnötig. Vielmehr wird in vielen Literaturstellen [40,45] auf ein lokales Verfahren zurückgegriffen, welches rekursiv angewandt das globale Delaunay-Kriterium erfüllt. Hierzu werden zunächst zwei an eine gemeinsame Kante grenzende Dreiecke betrachtet (Abbildung 3.5). Der Umkreis eines der beiden Dreiecke wird berechnet und es wird geprüft, ob der der Kante gegenüberliegende Punkt des zweiten Dreiecks davon eingeschlossen wird. Ist dies der Fall, so muss die Kante getauscht werden. Dieser Test wird rekursiv auf alle Kanten angewendet, bis keine Kante mehr modifiziert werden muss; somit ist das globale Delaunay-Kriterium erfüllt.

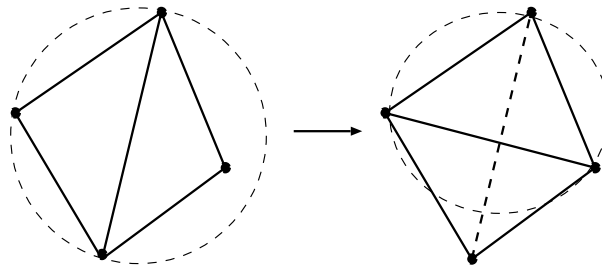


Abbildung 3.5: Kantentausch, falls das lokale Delaunay-Kriterium nicht erfüllt wird

Für die Oberflächentriangulierung einer im Raum gekrümmten Fläche wird ein modifiziertes Kriterium genutzt. Statt des Umkreises wird eine Umkugel berechnet, auf deren Äquator die Dreieckspunkte liegen. Das modifizierte Delaunay-Kriterium gilt dann als nicht erfüllt, falls der der Kante gegenüberliegende Punkt des Nachbardreiecks von der Kugel umschlossen wird. Es wird dabei davon ausgegangen, dass die Abweichung des Dreieckspaares von einer gemeinsamen Ebene vergleichsweise klein bleibt.

c) Netzglättung

Neben der Anwendung des modifizierten Delaunay-Kriteriums zur Verbesserung der Netzqualität ist der Einsatz eines Glättungsverfahrens unbedingt notwendig. Bei der Netzglättung wird ein Knotenpunkt auf der analytischen Oberfläche derart verschoben, dass sich die Qualität des Netzes lokal verbessert, d.h. günstigere Dreieckswinkel entstehen. Diese Verschiebung wird zweckmäßigerweise im Parameterraum vorgenommen, da so gewährleistet ist, dass der verschobene Punkt auf der Fläche verbleibt. Andererseits ist die neue optimale Punktposition am zuverlässigsten im dreidimensionalen Raum zu berechnen.

Der hier angewandte Netzglätter gehört zur Familie der Laplace-Methoden. Die Netz-

knoten werden durchlaufen und eine neue optimale Position in Abhängigkeit zur Lage der Nachbarkunkte wird berechnet. Es sei \vec{P} der aktuell betrachtete Punkt. Die optimierte Position \vec{P}' berechnet sich zu

$$\vec{P}' = \frac{\sum_i^{N_T} A_{T,i} \cdot \vec{S}_{T,i}}{\sum_i^{N_T} A_{T,i}}$$

Hierbei bezeichnet der Index i alle an P angrenzenden Dreiecke. Die Größe $A_{T,i}$ bezeichnet den Soll-Flächeninhalt des Dreiecks i , der Ortsvektor $\vec{S}_{T,i}$ seinen Schwerpunkt. Der Soll-Flächeninhalt berechnet sich mit Hilfe der lokalen Sollnetzdicke G_j an Punkt j mit der Beziehung

$$A_{T,i} = |\vec{P}_j - \vec{P}_k| \cdot \left(\frac{1}{G_j} + \frac{1}{G_k} \right),$$

wobei die Punkte j und k die Endpunkte derjenigen Dreieckskante sind, die dem Punkt P gegenüberliegt.

Die Verschiebung des Punktes \vec{P} im Parameterraum der Fläche wird mit Hilfe einer lokalen Linearisierung berechnet. So wird sichergestellt, dass der Punkt \vec{P} jederzeit auf der Körperfläche verbleibt. Die Verschiebungsprozedur wird so lange wiederholt, bis sie gegen eine optimale Punktlage konvergiert.

d) Gesamtablauf für eine Körperfläche

Mit den vorangehend vorgestellten Techniken kann eine einzelne Fläche eines BRep-Körpers wie folgt trianguliert werden:

1. Aufruf des Rising-Bubble-Algorithmus zur Erzeugung einer ersten Triangulierung (Abbildung 3.2)
2. Einfache Verfeinerung der Gebietsränder mit Hilfe der Kantenteilung (Abschnitt „Dreiecksverfeinerung“). Beim Einfügen neuer Gitterpunkte auf Randkanten der Triangulierung muss beachtet werden, dass diese konform zu den Randpunkten einer eventuellen Nachbarfläche erzeugt werden. Nur dann lässt sich eine ganzheitlich geschlossene Triangulierung für den gesamten BRep-Körper ermitteln. Diese Art der Verfeinerung wird im Wechsel mit der Schwerpunktverfeinerung (Schritt 3) vorgenommen.
3. Netzverfeinerung durch einfache Iteration aller Dreiecke der Triangulierung. Falls die lokale Netzdichte für das aktuell betrachtete Dreieck unter ihrem Sollwert liegt, so wird eine Schwerpunktverfeinerung vorgenommen (Abschnitt „Dreiecksverfeinerung“). Falls keine weiteren Punkte eingefügt wurden, weiter bei Schritt 6.

4. Rekursiver Kantentausch zur Erfüllung des globalen Delaunay-Kriteriums
5. Netzglättung, anschließend zurück zu Schritt 2.
6. Ende der Flächentriangulierung

Die einzelnen Teilflächen können anschließend bei Bedarf zu einer geschlossenen Oberflächentriangulierung zusammengesetzt werden. Dieser Schritt ist jedoch für die im nächsten Abschnitt beschriebene Volumenvernetzung nicht erforderlich.

Das Resultat dieses Algorithmus ist in Abbildung 3.6 sowie Abbildung 3.7 dargestellt.

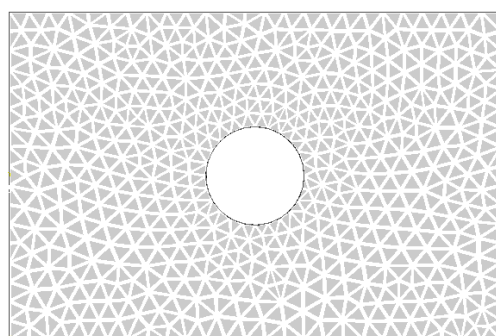


Abbildung 3.6: Fertige Triangulierung

3.2.2 Oberflächentriangulierungen von 3-D-Graustufenbildern

Für die Arbeit an einer physiologischen Geometrie wie der Nase bilden Daten aus einem Computertomographen- oder Magnetresonanztomographenscan die wichtigste Informationsquelle. Diese werden in dreidimensionalen Graustufenbildern, eingebettet in das in der Medizintechnik weit verbreitete DICOM-Format [32], gespeichert und weitergegeben. Zur weiteren Bearbeitung ist es nötig, die Oberfläche des gescannten Gewebes anhand eines Grautons zu identifizieren und eine Oberflächentriangulierung zu extrahieren.

Im Prinzip ist diese Aufgabenstellung analog zu der Erstellung von Isoflächen für z.B. Plotting-Programme. Der in der Literatur häufig anzutreffende Ansatz dafür ist das sog. Marching-Cubes-Verfahren [27]. In dieser Arbeit wurde ein geringfügig anderer Lösungsweg gewählt.

Ein Satz von acht Pixeln eines Graustufenbildes kann als kartesisches Würfelement betrachtet werden. Dieses kann innerhalb eines ijk -abzählbaren Feldes eindeutig und

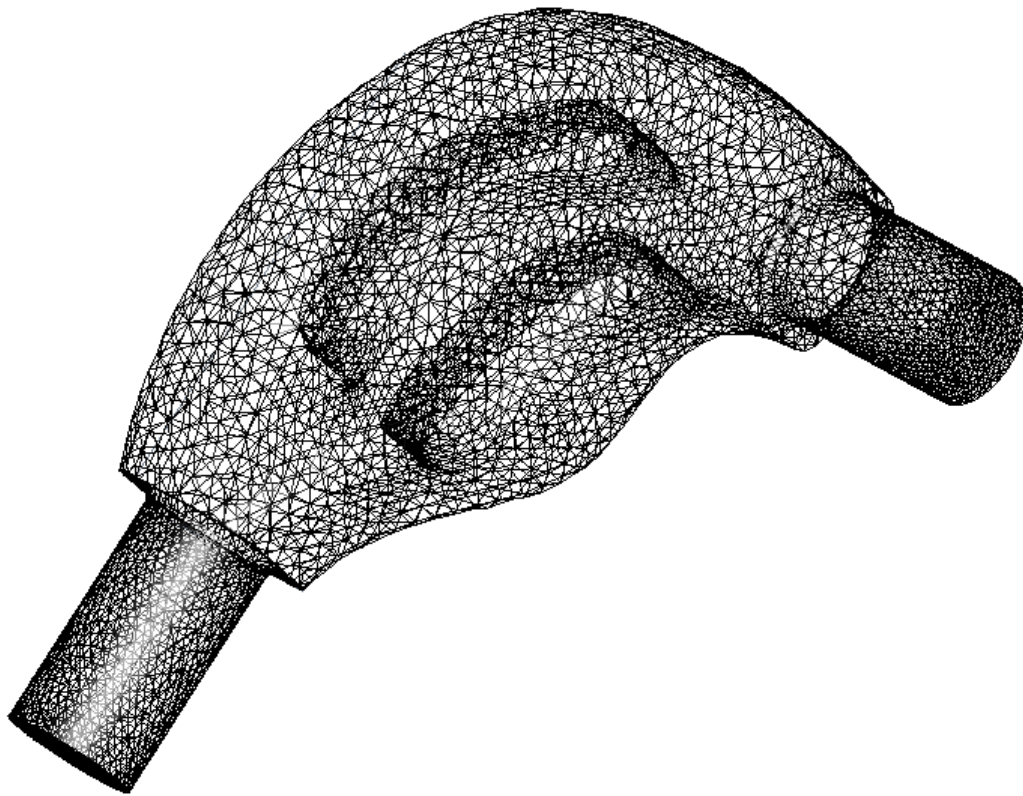


Abbildung 3.7: Triangulierung eines nasenähnlichen BRep-Körpers

ohne Verletzung von Anschlussbedingungen in sechs Tetraeder zerlegt werden (Abbildung 3.8). An diesen Tetraedern kann ein Teilstück der Isofläche mit einem oder zwei Dreiecken ermittelt werden.

Sobald die Oberfläche einer zu vernetzenden Geometrie in Form einer oder mehrerer Triangulierungen bekannt ist, kann im nächsten Schritt der Volumennetzgenerator genutzt werden.

Die direkte Verarbeitung von DICOM-Dateien stellte sich als machbar heraus, liefert jedoch leider nur Oberflächennetze von schlechter Qualität, d.h. unnötig viele Dreiecke mit relativ ungünstigen Innenwinkeln. Zudem werden die bei qualitativ schlechten Aufnahmen zahlreichen Artefakte mit in der Triangulierung verbaut. Eine Verbesserung dieses Zustandes kann nur mit Hilfe umfangreicher Bildverarbeitungsalgorithmen erzielt werden.

3.2.3 Verarbeitung von Dateien im STL-Datenformat

Da die direkte Verarbeitung von DICOM-Dateien für die Generierung von Oberflächengittern sehr aufwändig ist, wird dieser Schritt einer kommerziellen Software [29] über-

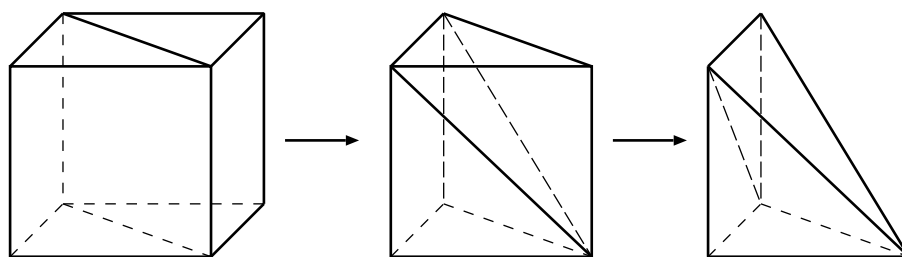


Abbildung 3.8: Zerlegung eines Würfels zunächst in zwei Prismen, dann in je eine Pyramide und ein Tetraeder

lassen. Diese ist in der Lage, qualitativ gute Triangulierungen zu erzeugen und im weit verbreiteten STL-Dateiformat auszugeben. Dieses Format beschreibt zwar die Geometrie, jedoch sind keine weiteren Informationen enthalten (z.B. Markierungscode für Ein- und Ausströmrand). Zudem sind die Dreiecke in diesem Format gespeichert, indem jedes einen Satz von Koordinaten seiner Eckpunkte besitzt. Übereinander liegende Eckpunkte sind daher mehrfach vorhanden. Dies hat zur Folge, dass das Format keine direkten topologischen Informationen enthält (d.h. keine Informationen über Nachbarschaften zwischen Dreiecken). Aus diesem Grunde sind auch bei der Verwendung von STL-Datensätzen weitere Verarbeitungsschritte erforderlich.

Zunächst müssen die einzelnen Dreiecke topologisch zusammengesetzt werden. Dazu werden mehrfach vorhandene, übereinander liegende Eckpunkte zu einem einzigen Netzknoten zusammengefasst. Die expliziten Koordinatenangaben werden durch eine indirekte Referenz ersetzt. Um für einen Punkt einen Satz von deckungsgleichen Punkten zu finden, wird eine Suchreduktion auf Basis einer Octree-Struktur genutzt (Anhang A.1). Dadurch wird der Aufwand für diesen Arbeitsschritt von $O(n^2)$ auf $O(n \log n)$ reduziert, wobei sich n proportional zur Anzahl der Punkte in der Triangulierung verhält.

3.2.4 Randcodierung

Für die Erzeugung von Rechengittern aus einer Oberflächentriangulierung sind reine Geometrieinformationen nicht ausreichend. Zur Unterscheidung von Ein- und Ausströmrand müssen wahlweise die Oberflächenelemente oder die zugehörigen Punkte mit einer Codierung versehen werden, die dem Volumennetzgenerator bzw. später dem Lösungsalgorithmus mitteilen, welche physikalischen Bedingungen an welchen Bereichen der Gebietsberandung vorherrschen soll.

Die Auswahl eines derartigen Teilbereiches kann interaktiv erfolgen. Der Benutzer selektiert z.B. durch Klicken in einer dreidimensionalen Ansicht einen Punkt innerhalb eines zu markierenden Bereiches. Mit diesem Punkt kann mit Hilfe der Betrachterposition eine Gerade konstruiert werden, die mindestens ein sichtbares Dreieck innerhalb des

Bereiches schneidet. Die Eckpunkte dieses Dreiecks werden entsprechend der gewünschten Randbedingung codiert. Anschließend werden rekursiv alle angrenzenden Dreiecke ebenfalls markiert. Dabei grenzten zwei Dreiecke genau dann aneinander, wenn sie eine gemeinsame Kante besitzen. Die dafür erforderliche Kantenliste wird aus den im vorangehenden Abschnitt gewonnenen topologischen Daten konstruiert.

Die Rekursion wird abgebrochen, wenn der Winkel zwischen den Normalenvektoren zweier benachbarter Dreiecke eine festgelegte Grenze (z.B. 20°) überschreitet. Auf diese Weise wird garantiert, dass der zu markierende Bereich durch eine ausreichend „scharfe“ Kante begrenzt bleibt. In Abbildung 3.9 ist eine derart markierte Nasengeometrie dargestellt.

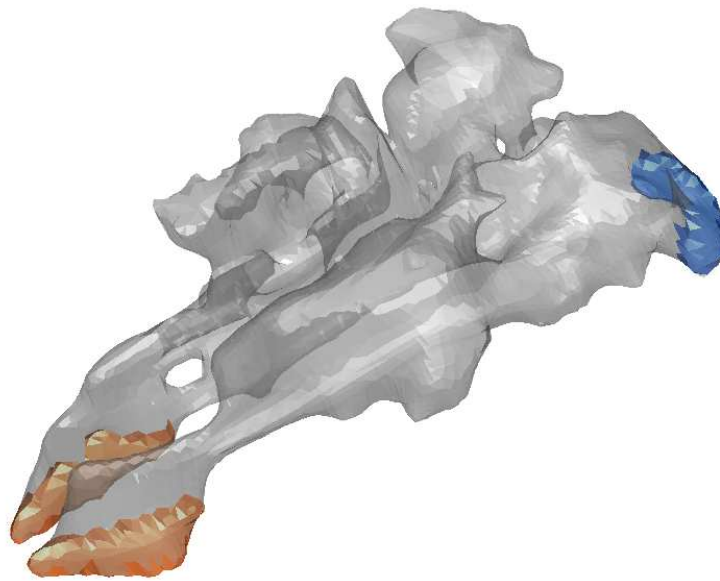


Abbildung 3.9: Oberflächengitter einer Nasenhaupthöhle mit Randmarkierungen an den Nasenlöchern und am Übergang zur Luftröhre

3.3 Kartesische Gitter mit Octree-Verfeinerung

Jedes numerische Feldproblem ist auf eine räumliche Diskretisierung des Rechengebietes angewiesen. Es existieren strukturierte und unstrukturierte Gitter und viele verschiedene Ansätze zur Gittererzeugung. Für das Problem der Naseninnenströmung spricht vieles für ein kartesisch-äquidistantes Rechengitter, da die Gittergenerierung für diesen Gittertypus gut automatisiert werden kann und in komplexen physiologischen Geometrien äußerst robust ist. Darüber hinaus ist die LBGK-Methode auf kartesische Gitter beschränkt. Auf der anderen Seite sind kartesische Gitter weder randkonform

noch ist es mit ihnen möglich, ausgeprägte Anisotropie (z. B. in Wandnähe) mit vertretbarem Aufwand aufzulösen.

Diese Nachteile können im Falle der Naseninnenströmung jedoch in Kauf genommen werden, da hier aufgrund der vergleichsweise moderaten Reynolds-Zahlen (Kapitel 7) keine außergewöhnlich dünnen Grenzschichten auftreten. Zusätzlich kann ein Rechengitter mit Hilfe sog. Patches (Flicken) lokal verfeinert werden, um Geometrie- oder Strömungsdetails hinreichend genau aufzulösen zu können. Die Speicherung dieser lokalen Verfeinerungen erfolgt nach dem Octree-Verfahren [2].

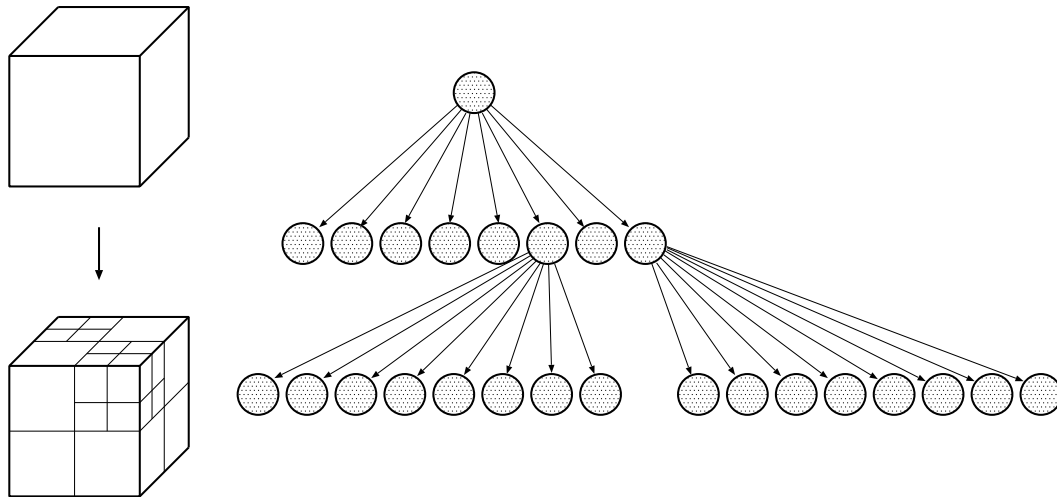


Abbildung 3.10: Octree, unterteilt in Teilvolumina. Rechts die zugehörige Datenstruktur

Ein Octree ist eine in der computergestützten Geometrieverarbeitung häufig genutzter Ansatz zur hierarchischen Gliederung eines dreidimensionalen Datensatzes (analog zum Binary tree, Quadtree in 1-D oder 2-D). Die Knoten eines Octree sind baumartig angeordnet. Jeder Knoten kann auf null bis acht untergeordnete Knoten verweisen, die jeweils ein Achtel des Datensatzes repräsentieren, die der Elternknoten umfasst. Umgekehrt kann jeder Knoten maximal einen Elternknoten besitzen. Knoten, die keinen weiteren Verweis auf ein übergeordnetes Element besitzen, werden als Wurzel („root“) bezeichnet. Referenziert ein Knoten keine weiteren untergeordneten Knoten, wird er als Blatt („leaf“) bezeichnet.

Im vorliegenden Fall identifiziert ein Knoten des Octrees ein Gitterelement (Abbildung 3.10). In vielen Fällen ist es jedoch schon ausreichend, nur die Blätter des Octree für das Gitter zu berücksichtigen. Die untergeordneten Knoten repräsentieren damit ein würfelförmiges Teilvolumen des Rechengebietes, dessen Größe ein Achtel des dem Elternknoten zugeordneten Teilvolumens entspricht (Oktant).

Der Ansatz, die geometrische Repräsentation einer Octree-Struktur als Rechengitter für numerische Strömungsprobleme zu nutzen, ist nicht neu. Es existieren zahlreiche

Publikationen zu diesem Thema [3, 39], die sich häufig auch mit der zweidimensionalen Variante, dem Quadtree, befassen. Der Autor erhebt weder Anspruch auf Vollständigkeit der in dieser Arbeit genannten Literaturquellen noch darauf, den besten Ansatz gewählt und implementiert zu haben.

3.3.1 Speicherung der Gitterpunkte

Die in dieser Arbeit verwendeten Gitter werden unstrukturiert gespeichert, d.h. es existiert eine sequentielle Punktliste und eine oder mehrere Elementlisten. Das Gitter ist nicht abzählbar. Die Lage der Punkte in der Liste gibt im Gegensatz zum strukturierten (abzählbaren) Fall keine Auskunft über deren Ortskoordinate und ihre Nachbarschaftsbeziehungen. Da beide jedoch wichtige Informationen zur Differenzenbildung darstellen, müssen sie explizit in der Punktstruktur gespeichert werden (Abbildung 3.11 und 3.12).

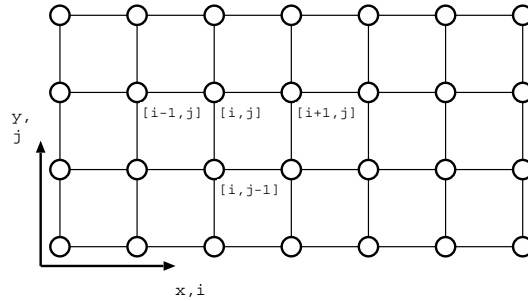


Abbildung 3.11: Strukturiertes Rechengitter

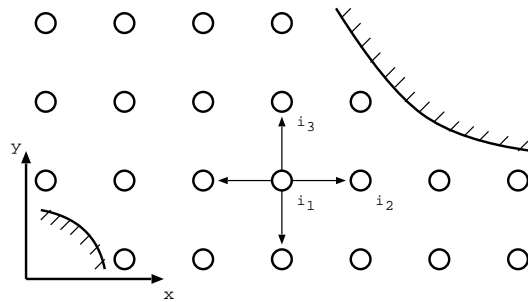


Abbildung 3.12: Unstrukturiertes Rechengitter

Der Variablentyp zur Speicherung eines Punktes des diskretisierten Gebietes hat den in Abbildung 3.13 dargestellten Aufbau.

Die Zahl der Nachbarschaften ist auf 14 beschränkt, bestehend aus sechs kartesischen Richtungen und acht Raumdiagonalen, wie sie im Falle des D3Q15-Lattices benötigt werden (Kapitel 2). Neben der Ortskoordinaten und Nachbarschaftsrichtungen werden

Attribut	Bedeutung
x,y,z	Punktkoordinaten
Level	Gitter- oder Verfeinerungslevel
Index	Index der Randbedingung
Code	Punktcodierung
Interpolating	Wenn gesetzt, kann ein Wert für diesen Punkt nur durch Interpolation ermittelt werden
IdxNeighb[14]	Nachbarschaftsindizes

Abbildung 3.13: Punktstruktur CartesianNode

zusätzliche Informationen gespeichert, namentlich der Gitterlevel, ein Randindex und eine Punktcodierung.

Der Gitter- oder Verfeinerungslevel gibt Auskunft darüber, welcher Verfeinerungsstufe der Punkt angehört. Deren genaue Definition wird im nächsten Abschnitt gegeben.

Die Punktcodierung bezeichnet die physikalische Bedeutung des Gitterpunktes. Es kann sich dabei um einen Feldpunkt oder einen Randpunkt handeln. In letzterem Falle zeigt der Randindex auf eine zusätzliche Informationsstruktur, die weitere Daten wie die Randnormale oder den Randabstand enthält.

3.3.2 Speicherung der Gitterelemente

Die Elemente des Rechengitters werden analog zu den Punkten sequentiell gespeichert. Der Unterschied besteht jedoch darin, dass für jeden Gitterlevel eine separate Elementliste existiert. Ein Gitterlevel ist dabei allgemein definiert als Teilgebiet des Gitters mit konstanter Schrittweite δx_i mit $i = x, y, z$. Der Level 0 ist dabei derjenige mit der größten Gitterschrittweite, die Schrittweite δx_i^n eines Levels n beträgt die Hälfte des nächstgrößeren Ortsschrittes $\delta x_i^{n-1} = 2 \delta x_i^n$ des Levels $n - 1$ (Abbildung 3.14). Aufgrund des für eine Octree-Struktur charakteristischen, hierarchischen Aufbaus muss jedes Gitterelement eines Levels $n > 0$ genau ein übergeordnetes (Eltern-) Element besitzen. Somit ist es möglich, dass sich Elemente überlappen, d.h. mehrere Elemente durch hierarchische Verfeinerung das gleiche Teilstück des Rechengebietes bedecken. Die Datenstruktur eines Gitterelements ist in Abbildung 3.15 dargestellt.

Die Zuordnung eines Gitterpunktes zu einem Verfeinerungslevel geschieht über diejenigen Elemente, welche den Punkt referenzieren. Das Element der höchsten Verfeinerungsstufe bestimmt den Level des fraglichen Punktes. Abbildung 3.16 stellt die Eckpunkt Nummerierung für ein einzelnes Gitterelement dar.

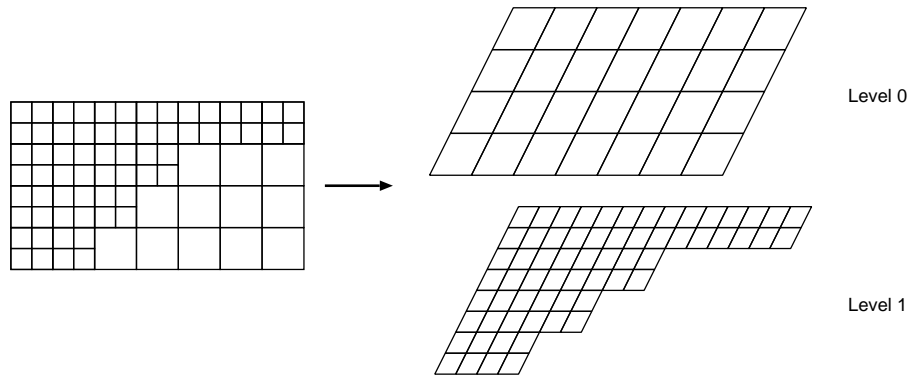


Abbildung 3.14: 2-D-Gitter mit 2 Verfeinerungsebenen

Attribut	Bedeutung
NodeIndex[8]	Indizes der Eckpunkte
Index	Elementnummerierung
Children[8]	Acht Kind-Elemente. Nicht besetzte Einträge werden mit -1 markiert.
Upper	Übergeordnetes (Eltern-) Element

Abbildung 3.15: Punktstruktur CartesianElement

3.3.3 Gittererzeugung

Der Algorithmus zur Gittererzeugung benötigt Eingabedaten in Form einer Oberflächentriangulierung (siehe Abschnitt 3.2) und Informationen darüber, wo und bis zu welchem Grade lokale Verfeinerungen in das Gitter eingebracht werden sollen. Das Verfahren arbeitet in mehreren Schritten, die im folgenden näher erläutert werden sollen.

Die Erzeugung von dreidimensionalen Octree-Gittern zur Strömungsberechnung wurde bereits in vielen Arbeiten erforscht und weiterentwickelt [3, 7, 39], unter anderem für die Implementierung eines Lattice-Boltzmann-Verfahrens. Aus diesem Grunde erfolgt die Beschreibung der genutzten Verfahren und Vorgehensweisen relativ knapp. Die wichtigsten Schwierigkeiten und Fehlerquellen bei der praktischen Umsetzung eines solchen Gittergenerators werden jedoch beschrieben.

a) Uniforme Elementerzeugung

Das durch die Oberflächentriangulierung definierte Gebiet wird zunächst mit einem uniformen kartesischen Gitter mit der Gitterschrittweite δx_i^0 gefüllt (Abbildung 3.17). Ein kartesisches Element wird erzeugt, wenn zumindest eines seiner Eckpunkte oder

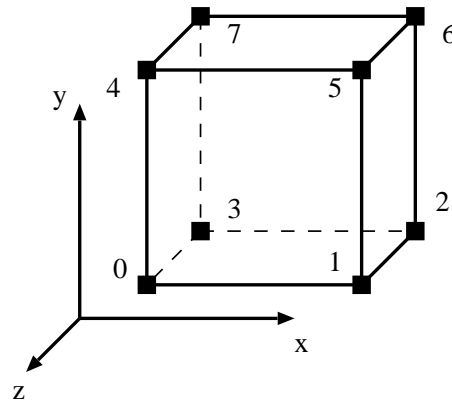


Abbildung 3.16: Element mit Eckpunktnummerierung

mindestens ein Eckpunkt seiner potentiellen Subelemente innerhalb des zu vernetzen-
den Volumens liegt. Nicht im Gebiet liegende Eckpunkte werden bereits in dieser Pha-
se als spätere Randpunkte markiert. Alle in diesem Arbeitsschritt erzeugten Elemente
werden dem Gitterlevel 0 zugeordnet.

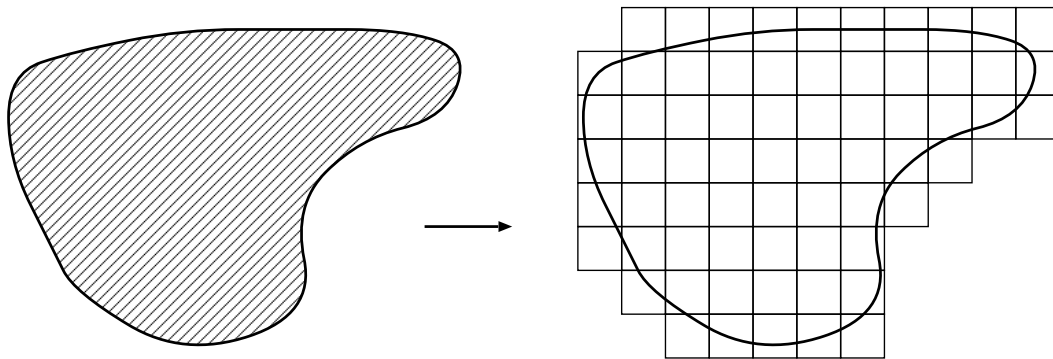


Abbildung 3.17: Uniforme Vernetzung eines berandeten Gebietes

Die Entscheidung, ob sich ein Punkt innerhalb oder außerhalb des Gebietes befindet,
wird wie folgt getroffen. Von der fraglichen Punktkoordinate wird eine Halbgerade
in Richtung der positiven x -Achse des Koordinatensystems konstruiert. Anschließend
wird ein Satz von Schnittpunkten dieser Halbgerade mit der Gebietsberandung be-
stimmt. Falls die Anzahl der gefundenen Punkte ungerade ist, liegt der Punkt im
Rechengebiet. Die Berechnung dieser Schnittpunkte ist sehr zeitaufwändig und zudem
kritisch, wenn die Halbgerade ein Oberflächenelement in einem sehr flachen Winkel
schneidet. Dementsprechend ist der algorithmische Aufwand für diese Aufgabe nicht
zu unterschätzen. Ein Teil der Schnittpunktberechnung kann dabei eingespart werden,
da ein Großteil der Informationen für Punkte mit übereinstimmenden y - z -Koordinaten
identisch ist.

b) Elementverfeinerung

Das im ersten Schritt erzeugte Basisgitter wird im nächsten Schritt hierarchisch verfeinert. Ein verfeinertes Element besitzt in der Regel acht Subelemente, die dem nächsthöheren Gitterlevel angehören (Abbildung 3.18). Falls sich eines dieser Subelemente vollständig außerhalb des Gebiets befindet, d.h. alle seine Eckpunkte und alle Eckpunkte seiner Subelemente außerhalb der Triangulierung liegen, so wird das Element nicht erzeugt und der Verweis im Elternelement bleibt unbesetzt. Umgekehrt besitzt jedes Subelement einen Verweis auf das Elternelement.

Die Entscheidung, welche Elemente verfeinert werden, wird vom Benutzer getroffen. Dieser kann beispielsweise definieren, ob ein Gebietsrand verfeinert wird (Abbildung 3.19). Ebenso kann er kugelförmige Verfeinerungszonen, sog. „Spots“, definieren, innerhalb derer Elemente bis zu einem festgelegten Level verfeinert werden.

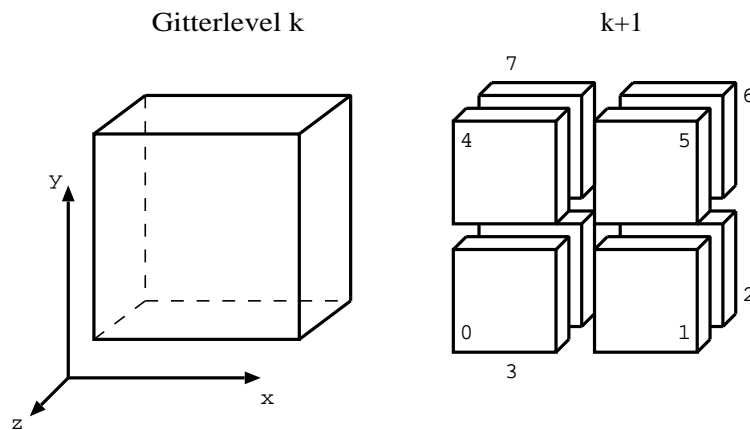


Abbildung 3.18: Element mit seinen acht möglichen Subelementen

Die bei der Elementverfeinerung zusätzlich erforderlichen Gitterpunkte werden bei Bedarf erzeugt und in die Punktliste aufgenommen. Für aufeinander liegende Elementecken werden Punkte gemeinsam genutzt. Das Auffinden bereits erzeugter Punkte geschieht mit Hilfe einer Octree-Suche (Anhang A.1). Für die Darstellung werden verfeinerte Elemente normalerweise ausgeblendet (Abbildung 3.19).

Bei diesem Vorgehen kann ein Element auch dann erzeugt werden, wenn keiner seiner Eckpunkte innerhalb des Rechengebietes liegt, nämlich dann, wenn es verfeinert wird. Anderenfalls kann es zu Situationen kommen, in denen randnahe Stellen des Rechengebietes nicht vernetzt werden (Abbildung 3.20). Das als fehlend bezeichnete Grobgitterelement würde ohne Verfeinerung nicht erzeugt werden, da alle seine Eckpunkte außerhalb der Berandung liegen. Wird das erzeugte Randelement jedoch wie dargestellt verfeinert, so ist es möglich, dass einer der neu eingefügten Punkte im Rechengebiet liegen (siehe grün markierter Punkt).

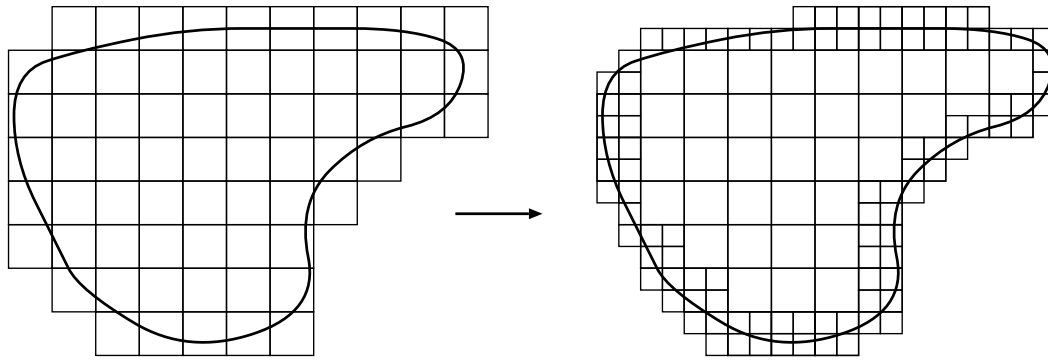


Abbildung 3.19: Gitter mit hierarchischer Randverfeinerung

Mit Hilfe eines rekursiven Vorgehens, bei dem neben den eigentlichen Elementeckpunkten auch alle Eckpunkte seiner möglichen Unterelemente geprüft werden, kann dieses Problem sofort bei der Elementerzeugung umgangen werden.

c) Gitterglättung

Beim Auftreten von mehr als zwei Gitterlevels muss aus algorithmischen Gründen (siehe Abschnitt 3.4) sichergestellt werden, dass alle Elemente nur Nachbarn besitzen, die entweder demselben Level angehören oder höchstens im nächstfeineren oder nächstgrößeren Level liegen. Dieser Prozess wird Gitter- oder Octreebalancierung genannt. In diesem Zusammenhang werden zwei Elemente dann als benachbart bezeichnet, wenn entweder zwei ihrer Flächen, zwei Kanten oder zwei Eckpunkte ganz oder teilweise zusammenfallen; der Algorithmus zur Nachbarnbestimmung wird in Anhang A.2 vorgestellt. Eine solche unzulässige Situation ist in Abbildung 3.21 für den zweidimensionalen Fall dargestellt.

Um die an Gebietsrändern auftretenden Grenzsichten zuverlässig auflösen zu können und die Formulierung der Randbedingungen zu vereinfachen, wird außerdem gefordert, dass jedes Randelement (d.h. Element mit mindestens einem Randpunkt) ausschließlich Nachbarelemente besitzt, die dem gleichen Level angehören.

Die Glättung des Gitters ist ein separat durchgeführter Arbeitsschritt. Vom größten zum feinsten Level werden alle Elemente durchlaufen. Zum aktuell betrachteten Element werden die Nachbarn bestimmt. Gehört ein Nachbarelement einem zu groben Level an, so wird es verfeinert (siehe Punkt b). Diese Prozedur wird solange wiederholt, bis keine unzulässige Nachbarschaft mehr gefunden wird (Abbildung 3.22).

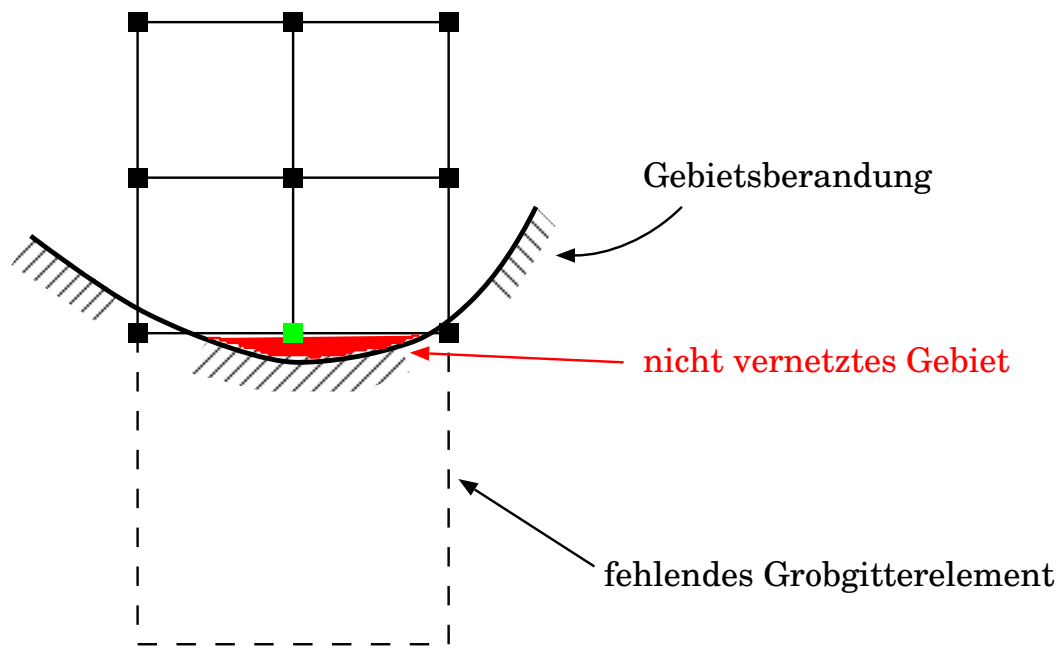


Abbildung 3.20: Nicht vernetzte Stelle des Rechengebietes

d) Bestimmung der Randcodierungen

Im letzten Arbeitsschritt werden die Codierungen der bereits erzeugten Randpunkte ermittelt. Dieser Vorgang ist algorithmisch aufgrund der Kenntnis des bereits mit Codierungen versehenen Oberflächengitters relativ einfach, jedoch soll an dieser Stelle erwähnt werden, dass hier der größte Teil der Rechenzeit bei der Gittererzeugung verbraucht wird. Der Grund dafür ist, dass für jede Verbindung eines Randpunktes ins Rechengebiet ein Schnittpunkt auf der Oberflächentriangulierung berechnet werden muss. Nur so lassen sich die erforderlichen Informationen, nämlich Codierung, Randabstand und Normalenvektor bestimmen. Das Rechenzeitverhalten dieses Arbeitsschrittes gestaltet sich entsprechend aufwändig.

e) Punktnachbarschaften und Interpolationsränder

Aus den fertig erstellten Punkt- und Elementlisten können die in Abschnitt 3.3.1 beschriebenen Punktnachbarschaften relativ leicht bestimmt werden. Auf dieselbe Art wird auch ermittelt, welchem Verfeinerungslevel ein Punkt angehört und ob er Teil des Interpolationsrandes ist.

Ein Punkt gehört dann zum Interpolationsrand, wenn er im Feld liegt und seine Nachbarschaftsliste nicht vollständig besetzt ist. Für einen solchen Punkt können die eigentlichen Berechnungsvorschriften (z.B. Transportschritt 2.22) in der Regel nicht an-

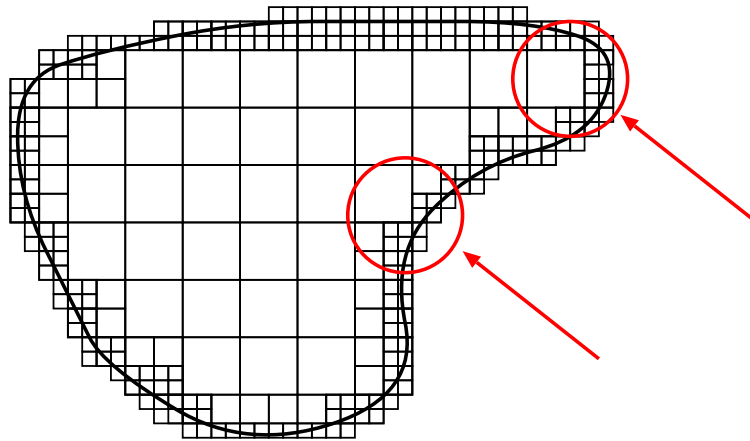


Abbildung 3.21: Ungeglättetes Gitter. Beispielhaft sind zwei nicht balancierte Stellen markiert.

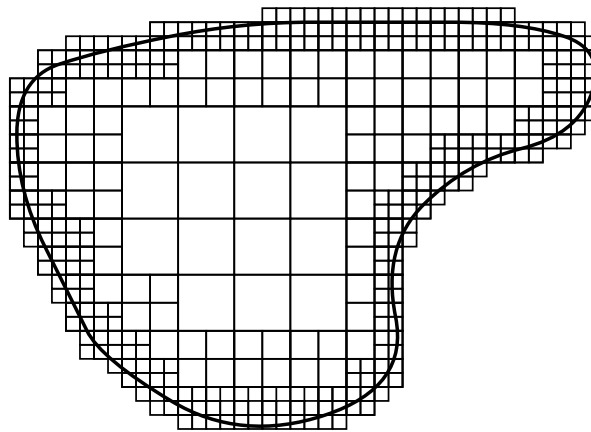


Abbildung 3.22: Geglättetes Gitter mit drei Verfeinerungsstufen

gewendet werden, sodass die Feldgrößen hier von benachbarten Punkten interpoliert werden müssen.

Darüber hinaus existieren Punkte, deren Nachbarn sowohl im eigenen als auch im angrenzenden Gitterlevel liegen (Abbildung 3.23). Der Gitterlevel eines Punktes wird dabei von dem feinsten Element festgelegt, das diesen als Eckpunkt enthält.

3.4 Anpassung der LBGK-Methode auf Octree-Gitter

Die Basisvariante des LBGK-Algorithmus wurde schon in Abschnitt 2.3.5 beschrieben. Die Berechnungsvorschriften zur lokalen Gitterverfeinerung wurden in Abschnitt 2.5

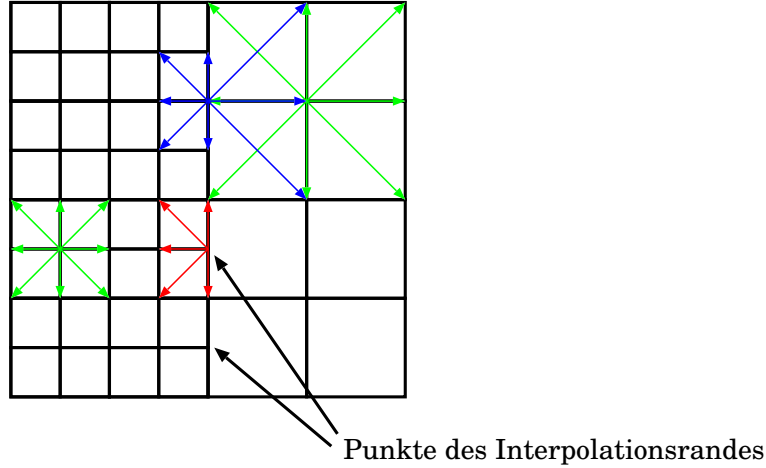


Abbildung 3.23: Verfeinerungszone mit Interpolationspunkten und verschiedenen Nachbarschaften. Reguläre, vollständige Nachbarschaften sind mit grünen Pfeilen angedeutet, gemischte Nachbarschaften blau und unvollständige Nachbarschaften rot.

vorgestellt. Die hier erstellte LBGK-Implementierung auf Octree-Gittern bereite jedoch einen solchen Zusatzaufwand, dass eine detaillierte Beschreibung an dieser Stelle gerechtfertigt erscheint. Vornehmlich verursacht werden diese Schwierigkeiten durch die vielen Fallunterscheidungen an den Übergangsbereichen zwischen zwei Verfeinerungsstufen.

Aufgrund der im gesamten Gebiet konstanten molekularen Geschwindigkeit $\xi_s = \frac{\delta x_\alpha}{\delta t}$ verringert sich der Zeitschritt δt in einem verfeinerten Gitterbereich entsprechend dem Verfeinerungsfaktor $m = \delta x_\alpha^k / \delta x_\alpha^{k+1}$. Für den verwendeten Gittertyp gilt dabei immer $m = 2$. Ein Zeitschritt auf einem groben Gitter k erfordert daher zwei Schritte auf dem nächstfeineren Gitter $k + 1$. Daher ist eine rekursive Verarbeitung notwendig (Algorithmus 2).

Der Kollisionsschritt kann dabei auf allen Feldpunkten ausgeführt werden, ohne zwischen regulären Feldpunkten und Punkten des Interpolationsrandes (Abschnitt 3.3.3) unterscheiden zu müssen. Die in Abschnitt 2.5 vorgestellte Berechnungsvorschrift zur Umskalierung zwischen verschiedenen Verfeinerungsstufen des Gitters wird im Transportschritt (Algorithmus 3) untergebracht. Aufgrund der hier notwendigerweise auftretenden Fallunterscheidungen ist dieser Schritt bei weitem aufwändiger als in der Basisvariante.

Bei der Nutzung der Umskalierungsvorschriften im Transportschritt stehen die benötigten Komponenten der Verteilungsfunktion f bzw. der Postkollisionsverteilung \tilde{f} nicht direkt an den Nachbarpunkten zur Verfügung, sondern müssen in der Regel vom zweiten Nachbarn in Richtung j ausgelesen werden. Die gewählte Implementierung des Transportschritts setzt ein balanciertes Octree-Gitter voraus (Abschnitt 3.3.3, Punkt c), damit sich ein Verfeinerungsfaktor von $m = 2$ und damit ein konstanter Umskalie-

Algorithmus 2 LBGK-Zeitschritt

Require: Gitterlevel k , beginnend mit dem größten Gitter $k = 0$.Setzen der **Randbedingungen**Führe aus: **Kollisionsschritt** (2.21) zur Berechnung der Postkollisionsverteilung \tilde{f} auf allen Punkten des Gitters k **if** $k < k_{max}$ **then** Führe aus: **1. LBGK-Zeitschritt** auf Gitter $k + 1$ Führe aus: **2. LBGK-Zeitschritt** auf Gitter $k + 1$ **end if**Führe aus: **Transportschritt** (2.22) zur Berechnung der Verteilungsfunktion f auf allen regulären Feldpunkten des Gitters k **Interpoliere** Verteilungsfunktion f auf allen Punkten des Interpolationsrandes des Gitters k **Ende** des Zeitschritts.

Algorithmus 3 Transportschritt

Require: k - Gitterlevel, \mathcal{P} - Menge der Punkte in k , $\mathcal{I} \subset \mathcal{P}$ - Menge der Interpolationpunkte in k , $\mathcal{F} = \mathcal{P} \setminus \mathcal{I}$ - Menge der regulären Feldpunkte**for all** Gitterpunkte $i \in \mathcal{F}$ **do** Sei $\vec{\xi}_0 = \vec{0}$. Kopiere $\tilde{f}_0|_i$ nach $f_0|_i$. **for all** Geschwindigkeitsrichtungen j mit $\vec{\xi}_j \neq \vec{0}$ **do** Sei j_1 diejenigen Geschwindigkeitsrichtung, für die gilt $\vec{\xi}_{j_1} = -\vec{\xi}_j$ Bestimme den Nachbarpunkt nb in Richtung j **if** Level $k_{nb} = k$ **then** Kopiere $\tilde{f}_{j_1}|_{nb}$ nach $f_{j_1}|_i$ **else if** Level $k_{nb} = k + 1$ **then** Kopiere $\tilde{f}_{j_1}|_{nb}$ nach $f_{j_1}|_i$ unter Verwendung der Umskalierungsvorschrift (2.60) **else if** Level $k_{nb} = k - 1$ **then** Kopiere $\tilde{f}_{j_1}|_{nb}$ nach $f_{j_1}|_i$ unter Verwendung der Umskalierungsvorschrift (2.61) **end if** **end for****end for**

rungsparameter ergibt.

3.5 Beispielgeometrien

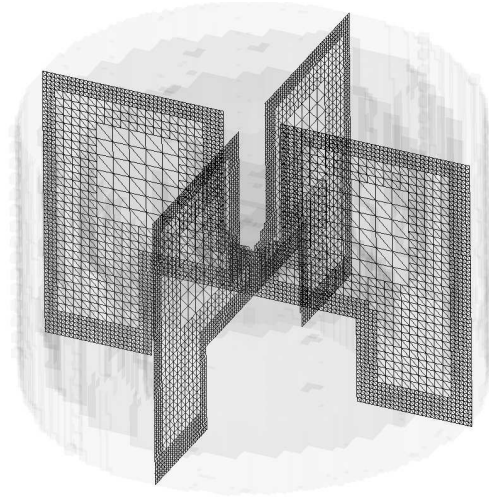


Abbildung 3.24: Reaktor

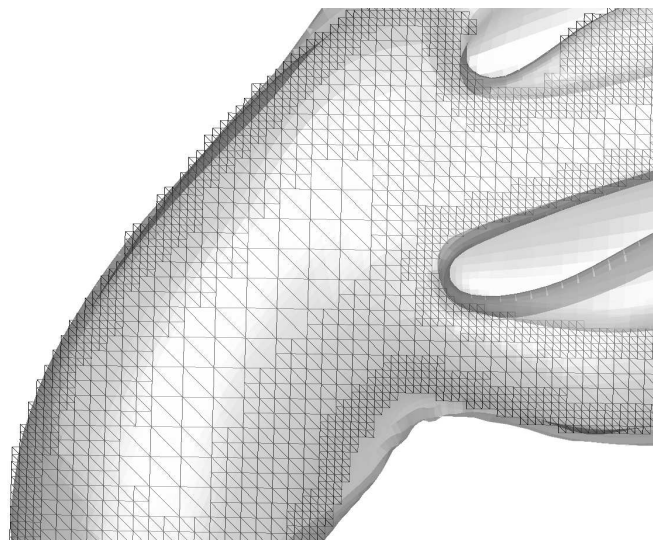


Abbildung 3.25: Modellnase

Kapitel 4

Integriertes Softwarekonzept

4.1 Motivation

Für den klinischen Einsatz der hier entwickelten Methoden ist es notwendig, eine geschlossene und integrierte Software zu erstellen, die die spezielle Problemstellung der Nasenströmung abdeckt und die erforderliche Prozesskette in durchgängiger Form zur Verfügung stellt. Gleichzeitig muss die Software flexibel genug sein, um Erweiterungen und Veränderungen an den implementierten Modellen vornehmen zu können.

Nicht zuletzt können viele der hier skizzierten Entwicklungen auf andere Problemstellungen übertragen werden. Es steht eine leistungsfähige Integrationsplattform zur Verfügung, die die praktische Anwendbarkeit von Entwicklungen aus dem wissenschaftlichen Umfeld fördern kann.

4.2 Modulares Konzept

Um die verschiedenen Aspekte der Strömungssimulation in der Nase in eine einheitlich bedienbare Umgebung zu bringen, wurde in dieser Arbeit ein modularer Programmieransatz verfolgt.

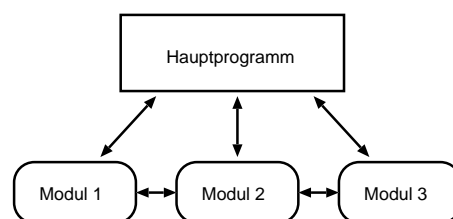


Abbildung 4.1: Kommunikationsstruktur der Hauptapplikation mit angeordneten Modulen. Die Pfeile symbolisieren die Kommunikationswege.

Der Kern dieser Entwicklung ist dabei ein Hauptprogramm, das Basisfunktionalitäten

(z.B. Visualisierung, Mausinteraktion usw.) zur Verfügung stellt [11]. Speziellere Methoden, z.B. Gittergenerierung, Gleichungslöser usw. wurden in Form von Modulen implementiert. Diese Module kommunizieren sowohl untereinander als auch mit dem Hauptprogramm mit Hilfe der Schnittstellentechnik CORBA (Abbildung 4.1). Dieser Ansatz erwies sich als sehr geeignet für eine ganze Reihe von Problemstellungen im Umfeld des wissenschaftlich-technischen Rechnens. Aufgrund der umfangreichen Entwicklungen auf diesem Gebiet im Rahmen dieser Arbeit ist eine detaillierte Beschreibung notwendig und für weitergehende Arbeiten von Interesse.

4.2.1 Schnittstellentechnik

Das Hauptprogramm und die einzelnen Module stellen separat zu kompilierende und ausführbare Programme dar, deren Kommunikation untereinander über eine definierte Schnittstelle erfolgt. Beim objektorientierten Entwurf einer Software ist ein Ansatz zu bevorzugen, der dem Programmierer gestattet, einzelne Objekte alleine aus der Kenntnis ihrer Schnittstelle und einer möglichst allgemeingültigen Referenz heraus anzusprechen. Es spielt dabei keine Rolle, wie ein solches Objekt implementiert wird (z.B. Wahl der Programmiersprache, Aufteilung einer Objekthierarchie auf einen oder mehrere Prozesse oder Hosts usw.). Eine Software, die die Umsetzung eines solchen Ansatzes gestattet, wird als Middleware bezeichnet.

Ein weit verbreiteter Industriestandard für eine solche Middleware ist CORBA [33]. Die in dieser Arbeit genutzte Implementierung des CORBA-Standards ist MICO [37]. Diese Software bietet sowohl die Möglichkeit, eine einheitliche Schnittstellendefinition vorzunehmen als auch allgemeingültige Objektreferenzen zu verwenden. Dazu bietet CORBA die Schnittstellensprache IDL (Interface Definition Language) sowie die IOR (Interchangeable Object Reference) an.

Die IDL ist eine C++-ähnliche Sprache, die die Definition von Klassenschnittstellen erlaubt. Im Gegensatz zu vollständigen objektorientierten Programmiersprachen enthält IDL jedoch keine Elemente zur Implementierung von Algorithmen. Die Objektimplementierung wird deshalb weiterhin mit einer konventionellen Programmiersprache erstellt. CORBA bietet damit eine echte Trennung von Schnittstellendefinition und Implementierung, welche einen Grundgedanken der objektorientierten Programmierung darstellt. Ein Beispiel für eine solche Schnittstellendefinition wird in Abbildung 4.2 gegeben.

Das zweite wichtige Element von CORBA ist die IOR. Diese erlaubt die eindeutige Identifizierung und Referenzierung eines Objektes. In einer konventionellen Programmiersprache wird diese Aufgabe z.B. von einem Zeiger übernommen. Ist die IOR eines Objektes bekannt, so können die in der IDL-Datei definierten Methoden mit seiner Hilfe angesprochen werden, unabhängig davon, wo sich das Objekt befindet (dies kann im selben Prozess sein, jedoch funktioniert diese Art der Kommunikation auch host- und sogar netzwerkweit).

<pre> interface NavStokesSolver { void SetInitialConditions(); void SetFlowIn(in double u_oo, in double v_oo); void SetFlowOut(in double p_oo); double Solve(in long timesteps); }; </pre>	<pre> class NavStokesSolver { void SetInitialConditions(); void SetFlowIn(double u_oo, double v_oo); void SetFlowOut(double p_oo); double Solve(long timesteps); }; </pre>
---	---

Abbildung 4.2: Klassenschnittstelle in IDL (links) und äquivalent in C++ (rechts)

Die dazu notwendigen Interprozess- oder Netzwerkoperationen werden automatisch ausgeführt und laufen für den aufrufenden Prozess verborgen ab. Diese Flexibilität rechtfertigt den Mehraufwand, den eine CORBA-basierte Anwendung sowohl an den Programmierer als auch an die Rechnerleistung stellt. Für ohnehin schon rechenintensive Anwendungen ist jedoch eine gute Balance nötig, nicht zu viele Ressourcen für den objektorientierten Ansatz zu verbrauchen.

Als reine Schnittstellentechnik bietet CORBA keine Elemente zur Implementierung von Algorithmen. Zu diesem Zweck wurde weiterhin überwiegend die Sprache C++ genutzt. Für kleine und oft zu ändernde Programme (z.B. Programme zur Menüführung) ist jedoch eine interpretierte Sprache sinnvoll. In dieser Arbeit wurde ein eigens dafür erstellter BASIC-Dialekt verwendet.

4.2.2 Aufbau der Module

Jedes in dieser Arbeit erstellte Modul besteht aus einem Objekt, welches als selbständiger Prozess abläuft. Die Module kommunizieren untereinander mit Hilfe der oben beschriebenen Schnittstellentechnik. Die Koordination und die Interaktion mit dem Benutzer wird von der Basisapplikation übernommen. Es existieren Module für

- Generierung von Oberflächengittern
- Verarbeitung von DICOM- und STL-Dateien
- Generierung von Volumengittern nach dem Octree-Prinzip
- Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen mit Hilfe des LBGK-Verfahrens
- Pre- und Postprocessing.

Dieser Ansatz erlaubt unabhängiges editieren einzelner Module bei gleichzeitiger Erhaltung der integralen Benutzeroberfläche. Zudem ist die Fehleranfälligkeit einer solchen

modularen Lösung bei weitem kleiner als bei einer monolithisch aufgebauten Applikation.

Kapitel 5

Weitergehende Transportmodelle

5.1 Temperatur- und Wasserdampftransport

Neben der reinen Luftströmung ist die Simulation des Wärme- und Stofftransports von besonderem Interesse, da die Klimatisierung der Atemluft eine der Hauptaufgaben der Nase darstellt. Untersuchungen zeigen, dass die Luft bei moderaten Umweltbedingungen vor Eintritt in die Lunge bereits nahezu auf Körpertemperatur erwärmt und mit Wasserdampf gesättigt wird [23]. Die dazu notwendige Energie sowie der Wassermassenstrom müssen von den Nasenschleimhäuten aufgebracht werden.

5.1.1 Thermodynamik der Nase

Aus technischer Sicht kann das Stoffgemisch, das durch die Nasenhaupthöhle strömt, als feuchte Luft klassifiziert werden. Aufgrund der Bedingungen in der Nasenhaupthöhle ($P = 1 \text{ bar}$, $T \leq 37^\circ\text{C}$) sind die Abweichungen der Stoffwerte des Gemischs von den Stoffwerten trockener Luft relativ klein. Zur Begründung wird folgender Extremfall betrachtet:

Die Atemluft habe am Naseneintritt eine Temperatur von $T = 20^\circ\text{C}$ und sei völlig trocken, d.h. der Wassermassenanteil oder Massenbruch des Wasserdampfes

$$\psi_W = \frac{m_W}{m_L + m_W}$$

sei null. Die Dichte beträgt dann $\rho_L(20^\circ\text{C}) = 1.1892 \text{ kg/m}^3$. Im günstigsten Fall gelingt es der Nase, die Luft bis zum Austritt auf Körpertemperatur zu erwärmen und vollständig mit Wasser zu sättigen. In diesem Falle steigt der Wassermassenanteil der Atemluft auf $\psi_W = 4.006\%$ an. Die Dichte des Gemisches ρ_{Mix} wird aus den Partieldichten der Reinstoffe Wasserdampf und Luft bei 37°C gebildet, jeweils gewichtet mit den Massenanteilen ψ_W und $\psi_L = 1 - \psi_W$. Damit ergibt sich eine Gemischdichte von $\rho_{Mix}(37^\circ\text{C}) = 1.107 \text{ kg/m}^3$. Die relative Abweichung zwischen diesen beiden

Extremfällen beträgt

$$\frac{\rho_{Ein} - \rho_{Aus}}{\rho_{Ein}} = 6.91\%.$$

Da sich die Gemischdichte im gesamten Feld in diesen relativ engen Grenzen bewegt, kann sie näherungsweise als konstant angesehen werden. Damit ergeben sich keine nennenswerten temperatur- oder gemischbedingten Rückwirkungen auf die Navier-Stokes-Gleichung bzw. auf das Geschwindigkeits- und Druckfeld.

5.1.2 Transportgleichungen für Wärme- und Stofftransport

Im Falle eines inkompressiblen Fluids ist die Energiegleichung von der Kontinuitäts- und Impulsgleichung entkoppelt. Sie läßt sich in einen mechanischen und einen thermischen Anteil aufteilen. Der mechanische Anteil ist linear abhängig vom Impulssatz und wird im allgemeinen nicht benötigt. Der thermische Anteil vereinfacht sich nach [18] zu

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial(\rho e)}{\partial x_\alpha} = \Phi + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right)$$

mit der thermischen Energie $e = cT$, dem Wärmeleitungskoeffizienten λ und der Dissipationsfunktion Φ , die im weiteren Verlauf nicht berücksichtigt und zu null gesetzt wird. Es ergibt sich eine partielle Differenzialgleichung der Temperatur T , die, wenn das Strömungsfeld v_α bekannt ist, unabhängig von Kontinuitäts- und Impulsgleichung gelöst werden kann:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} = \left(\frac{\lambda}{c\rho} \right) \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) \quad (5.1)$$

Der Ausdruck $\lambda/(c\rho)$ wird als Temperaturleitzahl bezeichnet. Analog zur Dichte ρ werden auch die übrigen Transportkoeffizienten λ sowie die spezifische Wärmekapazität c als konstant angenommen.

Zur Berücksichtigung des Stofftransports wird das Fick'sche Gesetz genutzt. Die Transportgleichungen für die Massenbrüche ψ_L und ψ_W lauten

$$\frac{\partial \psi_L}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial \psi_L}{\partial x_\alpha} = D_{AB} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial \psi_L}{\partial x_\alpha} \right) \quad (5.2)$$

und

$$\frac{\partial \psi_W}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial \psi_W}{\partial x_\alpha} = D_{AB} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial \psi_W}{\partial x_\alpha} \right) \quad (5.3)$$

Der Diffusionskoeffizient D_{AB} kann im Falle des vorliegenden Gemisches relativ leicht ermittelt werden, entweder durch Entnahme aus einem Tabellenwerk oder Nutzung einer Korrelationsformel für ein binäres Gasgemisch [36].

5.1.3 Diskretisierung

Bedingt durch die formale Ähnlichkeit der Transportgleichungen (5.1) bis (5.3) können einheitliche Diskretisierungsmethoden angewendet werden. Die Formeln für Temperatur- und Stofftransport entsprechen dem Typ der Konvektions-Diffusionsgleichungen, die im allgemeinen die Form

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} = \gamma \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} \right) \quad (5.4)$$

aufweisen. Die konvektiven Anteile wurden sofort auf die linke, die diffusiven auf die rechte Seite der Gleichung sortiert. Die Ortsableitungen $\partial \varphi / \partial x_\alpha$ und $\partial / \partial x_\alpha (\partial \varphi / \partial x_\alpha)$ in Raumrichtung α werden mit Hilfe von Zentraldifferenzen approximiert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} &= \frac{\varphi(\vec{x} + \vec{\delta x}_\alpha) - \varphi(\vec{x} - \vec{\delta x}_\alpha)}{2 \delta x_\alpha} + O(\delta x_\alpha^2) \\ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\alpha^2} &= \frac{\varphi(\vec{x} + \vec{\delta x}_\alpha) + \varphi(\vec{x} - \vec{\delta x}_\alpha) - 2 \varphi(\vec{x})}{\delta x_\alpha^2} + O(\delta x_\alpha^2). \end{aligned}$$

Zur Zeitintegration wird ein 3-Schritt Runge-Kutta-Schema verwendet:

$$\begin{aligned} \varphi^{(0)} &= \varphi^n \\ \varphi^{(1)} &= \varphi^n - \alpha_1 \Delta t \operatorname{Res}(\varphi^{(0)}) \\ \varphi^{(2)} &= \varphi^n - \alpha_2 \Delta t \operatorname{Res}(\varphi^{(1)}) \\ \varphi^{(3)} &= \varphi^n - \alpha_3 \Delta t \operatorname{Res}(\varphi^{(2)}) \\ \varphi^{n+1} &= \varphi^{(3)}, \end{aligned}$$

wobei n die diskrete Zeitebene repräsentiert und der Ortsoperator der Gleichung (5.4) in der Form

$$\operatorname{Res}(\varphi) = v_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} - \gamma \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} \right)$$

zusammengefasst wurde. Mit den Koeffizienten $\alpha_{1,2,3} = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1$ ergibt sich eine Genauigkeit von $O(\delta t^2)$ in der Zeit.

Für die Größenabschätzung der einzelnen Terme wird die Gleichung (5.4) zunächst mit Hilfe der Definitionen

$$\varphi^* = \bar{\varphi} \varphi, \quad x^* = x \bar{L}, \quad v_\alpha^* = v_\alpha \bar{v} \quad \text{und} \quad t^* = \frac{\bar{L}}{\bar{v}}$$

normiert, wobei die dimensionsbehafteten Variablen zur besseren Unterscheidung mit

einem Stern * markiert wurden. Es ergibt sich die dimensionslose Gleichung

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_\alpha} \right)$$

mit der Peclet-Zahl

$$Pe = \frac{\bar{v} \bar{L}}{\gamma^*}.$$

Analog zur Reynolds-Zahl ist sie ein Maß für das Verhältnis des konvektiven zum diffusiven Transport und bestimmt damit die Größenordnung der diffusiven Terme in Gleichung (5.4).

Um die physikalisch bedingte Diffusion bei großer Peclet-Zahl ausreichend in der Simulation zu berücksichtigen, muss die durch den Diskretisierungsfehler eingebrachte, numerische Diffusion oder numerische Viskosität vergleichsweise klein bleiben. Diese numerische Viskosität hängt von der Feinheit des Rechengitters ab.

Im Falle einer reinen Gasströmung bewegt sich die Peclet-Zahl sowohl für den Wärmetransport als auch für den Stofftransport im Bereich der Reynolds-Zahl, da

$$Pe_{\text{Wärmetransport}} = Re Pr \quad \text{und} \quad Pe_{\text{Stofftransport}} = Re Sc.$$

In Gasen gilt für die Prandtl-Zahl Pr und die Schmidt-Zahl Sc jedoch

$$Pr < 1 \quad \text{und} \quad Sc < 1,$$

sodass ein Rechengitter, das für die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen ausreichend genau bleibt, in diesem Falle auch für die Lösung der Gleichungen für Wärme- und Stoffübertragung geeignet ist.

5.1.4 Randbedingungen

Die Randbedingungen für die partiellen Differenzialgleichungen des Wärme- und Stofftransport bestimmen maßgeblich das simulierte Problem. Leider ist es im Falle von physiologischen Rändern wie der Nasenschleimhaut nicht möglich, eine genaue Gesetzmäßigkeit ohne parallel stattfindende Versuche am lebenden Patienten anzugeben. Die in diesem Abschnitt vorgestellten Modellannahmen sind daher nur sehr grobe Abschätzungen für die Prozesse an der Nasenwand. Zudem wurde nur der stationäre Einatemvorgang betrachtet.

Für die Temperatur wurden Dirichlet'sche Randbedingungen an Eintritt und an der Nasenwand angenommen, d.h.

$$\begin{aligned} T|_{\text{Eintritt}} &= T_1 \\ T|_{\text{Wand}} &= 37^\circ\text{C}. \end{aligned}$$

Der Wärmestrom über die Nasenwand ist damit im Allgemeinen ungleich null, sodass für $T_1 < 37^\circ\text{C}$ eine Aufheizung der Atemluft modelliert wird. Am Austritt wird T extrapoliert.

Die Randbedingungen für den Wasserdampfanteil in der Atemluft wurde ebenfalls über Dirichlet'sche Randbedingungen modelliert:

$$\begin{aligned}\psi_L|_{\text{Eintritt}} &= \psi_{L,1} & \psi_W|_{\text{Eintritt}} &= \psi_{W,1} \\ \psi_L|_{\text{Wand}} &= 0.959940 & \psi_W|_{\text{Wand}} &= 0.040060\end{aligned}$$

Die Wandwerte für ψ entsprechen den Massenbrüchen für vollständig gesättigte Luft ($\varphi = 100\%$) bei einer Temperatur von 37°C und Normaldruck. Es wird also angenommen, dass die Nasenschleimhaut die eintretende Atemluft in unmittelbarer Wandnähe auf Körpertemperatur aufwärmen und vollständig mit Wasser sättigen kann. Die daraus resultierenden Berechnungsergebnisse sowie eine globale Massen- und Energiebilanz werden in [12] und im Ergebnisteil dieser Arbeit (Kapitel 6) vorgestellt.

5.2 Partikeltransport

Neben der Klimatisierung muss die Nase zusätzlich die Atemluft filtern, d.h. mit dem Luftstrom mitgeführte Partikel abscheiden. Bei diesen Partikeln kann es sich sowohl um Feststoffe (z.B. Staub) als auch um zerstäubte Flüssigkeitströpfchen (Aerosole) handeln.

5.2.1 Modellierung der Partikelphase

In verschiedenen Literaturquellen [15] werden Partikel als Kontinuum mit eigenständiger Transportgleichung modelliert. Diese ist prinzipiell vom Typ Konvektions-Diffusionsgleichung (5.4), kann jedoch zusätzliche Quellterme beinhalten, die die Interaktion von Partikeln untereinander modellieren. Analog zur kinetischen Gastheorie sind auch Verteilungsfunktionen für Partikel vorstellbar und werden in der Praxis genutzt.

In dieser Arbeit werden Partikel jedoch mit Hilfe eines Lagrange-Ansatzes nach [8, 26] modelliert. Hierzu wird jedes Partikel als Kugel betrachtet, die sich durch das durchströmte Integrationsgebiet bewegt und verschiedenen Kräften unterliegt. Diese Art der Modellierung ist besonders geeignet für große Partikel (ab $1\,\mu\text{m}$ Durchmesser) in relativ geringen Konzentrationen, bei denen ein Kontinuumsansatz nicht mehr gerechtfertigt erscheint. Die auf das Partikel wirkenden Kräfte können je nach Problemstellung individuell modelliert werden. Die Rückwirkung auf das Fluid wird vernachlässigt.

5.2.2 Bewegungsgleichungen sphärischer Partikel

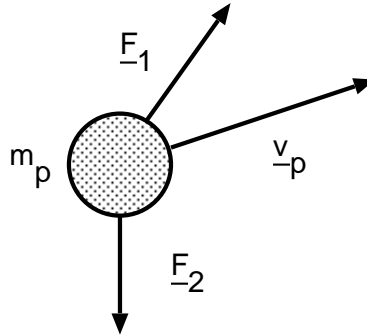


Abbildung 5.1: Partikel mit Geschwindigkeit \vec{v}_p und Masse m_p

Sphärische oder kugelförmige Partikel können als Punktmassen modelliert werden (Abbildung 5.1). Für sie gilt selbstverständlich der Impulssatz, d.h. das Produkt aus Partikelmasse m_p und Partikelbeschleunigung $\frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t}$ ist gleichzusetzen mit der Summe aller angreifenden Kräfte:

$$m_p \frac{\partial \vec{v}_p}{\partial t} = \sum_i \vec{F}_i \quad (5.5)$$

Um ein Partikel durch das Integrationsgebiet verfolgen zu können, muss seine Ortskoordinate ebenfalls gespeichert und mit jedem Zeitschritt ggf. neu berechnet werden. Die Differenzialgleichung für den Ortsvektor lautet

$$\frac{\partial \vec{x}_p}{\partial t} = \vec{v}_p. \quad (5.6)$$

Beide Gleichungen werden für jedes Partikel separat ausgewertet und werden als Langevin-Gleichungen bezeichnet.

5.2.3 Kräfte am Partikel

Die auf ein Einzelpartikel wirkenden Kräfte entstehen durch sehr unterschiedliche physikalische Effekte. Sehr kleine Partikel, sogenannte Nanopartikel ($d_p \sim O(1 \cdot 10^{-9} \text{ m})$) unterliegen u.a. der Brown'schen Bewegung, hervorgerufen durch Kollision mit Molekülen aus der umgebenden Gasphase.

Hohe Temperaturen und große Temperaturgradienten verursachen die sogenannten thermophoretischen Kräfte, durch die ein Partikel entgegen des Temperaturgradienten beschleunigt wird.

Außerdem unterliegen Partikel in Wandnähe den Van-der-Waals-Kräften. Diese beschleunigen das Partikel in Richtung Wand.

Die beiden für die vorliegende Problemstellung der Nasenströmung wichtigsten Kräfte sind zum einen die Widerstandskraft eines Partikels in der umgebenden Strömung. Für ein kugelförmiges Partikel wird der Ansatz

$$\vec{F}_W = \frac{1}{2} c_{W,p} \rho_0 A_p (\vec{u} - \vec{v}_p) \cdot |\vec{u} - \vec{v}_p| \quad (5.7)$$

gewählt; $c_{W,p}$ bezeichnet den Widerstandsbeiwert, A_p die Projektionsfläche des Partikels. Die Dichte des umgebenden Fluids wird als ρ_0 , seine lokale Geschwindigkeit an der Stelle \vec{x}_p als \vec{u} bezeichnet. Der Ansatz vernachlässigt demnach die Ausdehnung des Partikels.

Der Widerstandsbeiwert $c_{W,p}$ wird mit Hilfe des Stokes-Ansatz für kriechende Strömungen bestimmt. Unter der Annahme kleiner Relativgeschwindigkeiten $|\vec{u} - \vec{v}_p|$ gilt

$$c_{W,p} = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} & Re_p < 0.01 \\ \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 \cdot Re_p^{0.687}) & \text{für } 0.01 \leq Re_p < 1000 \\ 0.44 & Re_p \geq 1000. \end{cases}$$

Die Definition der Partikel-Reynoldszahl lautet

$$Re_p = \frac{|\vec{u} - \vec{v}_p| d_p}{\nu}.$$

Neben der Widerstandskraft hat zum anderen die Gravitation maßgeblichen Einfluss auf die Partikelbewegung. Diese lautet

$$\vec{F}_G = m_p \vec{g} = \rho_p \frac{\pi}{6} d_p^3 \vec{g}. \quad (5.8)$$

Hierbei ist ρ_p die Dichte des Partikelmateri als.

Die zu Beginn dieses Abschnitts aufgezählten Kräfte sind für die vorliegende Problemstellung nicht relevant, da ihr Einfluss bei den betrachteten Partikelgrößen ($1 \cdot 10^{-6} \text{ m} \leq d_p \leq 15 \cdot 10^{-6} \text{ m}$) und unter normalen Umweltbedingungen verschwindend gering ist. In [25] werden auch diese Kräfte modelliert.

Trotz dieser Beschränkung hängen die berechneten Partikeltrajektorien und damit die Filterfunktionalität der Nasenhaupthöhle von einer Vielzahl von Parametern ab. Zur Zusammenfassung dieser Parameter zu einer einzelnen Kenngröße wird die Stokes-Zahl Stk eingeführt [15]:

$$Stk = \left(\frac{d_p}{d_f} \right)^2 \frac{\rho_p}{\rho_0} \frac{Re}{18}. \quad (5.9)$$

Neben den bereits bekannten Größen wie Partikeldichte und -durchmesser sind darin eine charakteristische makroskopische Länge der durchströmten Konfiguration, z.B. der Querschnittsdurchmesser d_f , sowie die Reynolds-Zahl der Strömung $Re = f(d_f)$ enthalten.

5.2.4 Diskretisierung und Verfolgung der Partikeltrajektorien

Die Kräfte der Strömung auf ein Partikel hängen von der Strömungsgeschwindigkeit an der Ortskoordinate des Partikel \vec{x}_p ab. Diese Ortskoordinate ändert sich mit der Zeit, sodass die Strömungsgrößen je nach neuer Lage des Partikels neu bestimmt werden müssen. Die Verfolgung einer Partikeltrajektorie mit zu jedem Zeitschritt neu zu berechnender Geschwindigkeiten stellt auf unstrukturiert gespeicherten Gittern ein erhebliches Problem dar, da die Ortskoordinate allein keinen direkten Rückschluss auf die lokale Punkadresse erlaubt. Aus diesem Grund ist es notwendig, dass jedes Partikel sein umgebendes Element abspeichert.

Zur Bestimmung der lokalen Strömungsgeschwindigkeit am Partikel werden die Eckpunkte des nunmehr bekannten Elements herangezogen. Die dort mit Hilfe der Verteilungsfunktion f ermittelten Geschwindigkeiten werden trilinear interpoliert. Anschließend wird das betreffende Partikel unter Anwendung der Gleichungen (5.5) und (5.6) bewegt. Die Berechnung der einzelnen Kräfte erfolgt mit Hilfe der Vorschriften aus dem voranstehenden Abschnitt.

Bewegt sich ein Partikel aus dem umgebenden Element heraus, so muss bestimmt werden, ob und in welchem Nachbarelement das Partikel zu liegen kommt. Nachbarelemente werden innerhalb eines Octree-Gitters mit Hilfe des in Anhang A.2 vorgestellten Algorithmus bestimmt. Voraussetzung ist, dass sich ein Partikel maximal mit der durch die Gitter- und die Zeitschrittweite gegebene numerische Geschwindigkeit $\vec{v}_{p,max} = \frac{\delta x}{\delta t_p}$ bewegt, d.h. die CFL-Bedingung $v_{p,max} \cdot \frac{\delta t_p}{\delta x} \leq 1$ erfüllt ist. Der Zeitschritt δt_p bezieht sich dabei auf das numerische Verfahren zur Lösung der gewöhnlichen Differenzialgleichung der Partikeltrajektorie (5.5) und (5.6).

Diese Gleichungen werden mit Hilfe einer Taylorreihenentwicklung diskretisiert:

$$\vec{x}_p^{n+1} = \vec{x}_p^n + \delta t_p \left. \frac{d\vec{x}_p}{dt} \right|^n + \frac{1}{2} \delta t_p^2 \left. \frac{d^2\vec{x}_p}{dt^2} \right|^n \quad (5.10)$$

$$= \vec{x}_p^n + \delta t_p \vec{v}_p^n + \frac{1}{2} \delta t_p^2 \left. \frac{d\vec{v}_p}{dt} \right|^n \quad (5.11)$$

$$\vec{v}_p^{n+1} = \vec{v}_p^n + \delta t_p \left. \frac{d\vec{v}_p}{dt} \right|^n \quad (5.12)$$

Die einzige in diesem gekoppelten System verbleibende, unbekannte Größe ist der Term $\frac{d\vec{v}_p}{dt}$, der mit Hilfe der Gleichung (5.5) und der für das jeweilige Modell benötigten Kräfte berechnet wird.

Es bleibt anzumerken, dass die Diskretisierung (5.10) von der Fehlerordnung $O(\delta t_p^2)$ und (5.12) von Fehlerordnung $O(\delta t_p)$ ist. Diese Einschränkung kann jedoch mit einem entsprechend klein gewählten δt_p ausgeglichen werden.

An Gebietsrändern kann kein neues umgebendes Element für ein Partikel ermittelt werden. In diesem Fall wird das Partikel entweder deponiert (Wand) oder aus der Partikelliste gelöscht (Ausströmrand).

Kapitel 6

Validierungsrechnungen

6.1 Validierung des LBGK-Algorithmus

Es wurden verschiedene Problemfälle berechnet, um die LBGK-Methode zu validieren. Die erzielten Ergebnisse wurden teilweise mit analytischen Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen verglichen, teilweise mit Testproblemen aus der Literatur. Im Zusammenhang mit inkompressiblen, laminaren Strömungen ist hier vor allem [41] zu nennen.

6.1.1 Laminar durchströmtes Rohr

Als ersten Testfall wurde ein laminar durchströmtes Rohr betrachtet. Für diesen speziellen Fall kann der Druckverlust ΔP zwischen Ein- und Austritt analytisch berechnet und mit dem numerischen Ergebnis verglichen werden. Die Abmessungen des Rohres sind in Abbildung 6.1 dargestellt, die Randbedingungen sowie Stoffdaten in Tabelle 6.1.

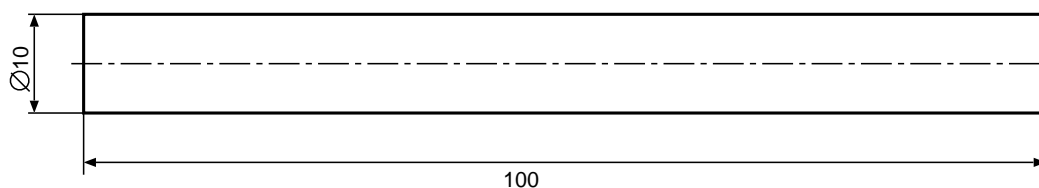


Abbildung 6.1: Rohrabmessungen in mm

Das Rohr wird von einer Schichtenströmung mit parabelförmiger Geschwindigkeitsverteilung durchströmt (Abbildung 6.2). Der Druckverlust kann anhand der Navier-Stokes-Gleichungen in Zylinderkoordinaten berechnet werden. Aufgrund der vorausgesetzten Rotationssymmetrie verschwinden alle Komponenten in φ -Richtung ($\frac{\partial}{\partial \varphi} = 0$). Zudem seien alle Geschwindigkeiten in Richtung φ und r identisch null, d.h. $u_\varphi \equiv 0$ und $u_r \equiv 0$.

Bezeichnung	Formelsymbol	Wert
Dichte	ρ	1.2 kg/m ³
Kinematische Viskosität	ν	0.001 m ² /s
Mittlere Einstömgeschwindigkeit	\bar{u}	2.5 m/s
Einstömprofil	$u(r)$	parabelförmig
Wandgeschwindigkeiten	\vec{u}_{Wand}	$\vec{0}$ m/s

Tabelle 6.1: Stoffdaten und Randbedingungen für Rohrströmung

Damit vereinfacht sich der Impulssatz zu

$$\frac{\partial P}{\partial r} = 0 \quad (\text{Radialkomponente})$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} = \nu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \quad (\text{Längskomponente}).$$

Der Druckgradient in Längsrichtung wird linear angesetzt als

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\frac{\Delta P}{l}.$$

Einsetzen in den Impulssatz und zweimalige Integration über den Rohrradius liefert die folgende Beziehung für den Druckabfall:

$$\Delta P = \frac{8 \bar{u} l \nu \rho}{R^2}. \quad (6.1)$$

Hierbei bezeichnet l die Rohrlänge und R den Rohrradius.

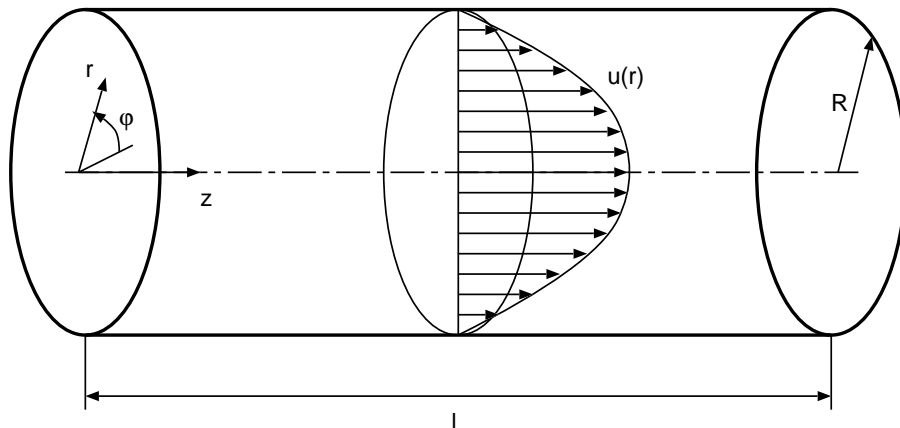


Abbildung 6.2: Laminare Strömung durch ein Kreisrohr

Um den LBGK-Algorithmus zu validieren, muss der numerisch gewonnene Druckver-

lust mit dem analytisch zu ermittelnden Verlust übereinstimmen. Dazu wird der Druck über zwei Querschnitte des Rechengitters gemittelt und die Differenz gebildet. Diese Querschnitte wurden bei $z = 10 \text{ mm}$ und $z = 90 \text{ mm}$ platziert. Der analytische Druckverlust ergibt sich damit zu

$$\Delta P_{\text{analytisch}} = 76.8 \text{ Pa.}$$

Der numerisch ermittelte Druckverlust beträgt

$$\Delta P_{\text{numerisch}} = 77.26 \text{ Pa.}$$

Die relative Abweichung beträgt 0.5959%.

Es bleibt anzumerken, dass das Rechengitter für dieses relativ einfache Validierungsbeispiel sehr groß ist (562495 Gitterpunkte). Die Gründe dafür sind:

- Die Geometrie weist ein relativ großes Verhältnis $l/R = 20$ auf. Da für ein gutes Ergebnis vorwiegend die Gradienten in r -Richtung ausreichend genau aufgelöst werden müssen, darf die Zahl der Punkte in diese Richtung einen bestimmten Wert nicht unterschreiten. Aufgrund des isotropen Aufbaus der Gitter ist damit auch die Zahl der Punkte in Längsrichtung entsprechend hoch.
- Das Rechengitter ist dreidimensional. Da der beschriebene LBGK-Algorithmus die Navier-Stokes-Gleichungen in kartesischen Raumrichtungen x , y , z approximiert statt in für dieses Problem wesentlich günstigeren Zylinderkoordinaten, kann nicht auf ein zweidimensionales Verfahren zurückgegriffen werden.
- Aufgrund des kartesisch-äquidistanten Rechengitters ist eine relativ hohe Punktzahl erforderlich, um die kreisförmige Querschnittsgeometrie ausreichend genau aufzulösen.

Fazit: Das LBGK-Verfahren liefert für laminar durchströmte Konfigurationen bei moderaten Reynoldszahlen einen recht genauen Wert für den integralen Druckverlust.

6.1.2 Laminare Zylinderumströmung

Die laminare Umströmung eines Rechtecks- bzw. Kreiszylinders in einem Kanal gehört zu den Standardtestfällen für inkompressible Strömungslöser wie dem LBGK-Verfahren. Der Grund dafür ist einerseits die Verfügbarkeit von guten Vergleichsdaten als auch die relativ anspruchsvolle Problemstellung, die viele verschiedene physikalische Phänomene hervorbringt. In [41] sind verschiedene Varianten der Zylinderumströmung dokumentiert. Die Problemstellung ist exakt umschrieben und es liegen Berechnungsergebnisse von zahlreichen Forschungsgruppen vor, die mit verschiedensten Verfahren erzielt wurden. In dieser Arbeit wurden einige Testfälle aufgegriffen, um die LBGK-Methode bzw. ihre Implementierung zu validieren.

Es wurden nur die dreidimensionalen Konfigurationen berücksichtigt. Die durchströmte Geometrie existiert dabei in zwei Varianten (Abbildung 6.3). Der Zylinder wird dabei jeweils von links durch die dem Betrachter zugewandten quadratischen Fläche der Kantenlänge $H = 0.41$ m angeströmt. Das Einströmprofil ist parabolisch. Die Reynoldszahl wird mit Hilfe der mittleren Einströmgeschwindigkeit \bar{u} sowie dem Zylinderdurchmesser D (identisch für beide Geometrieen) gebildet:

$$Re = \frac{\bar{u} D}{\nu}.$$

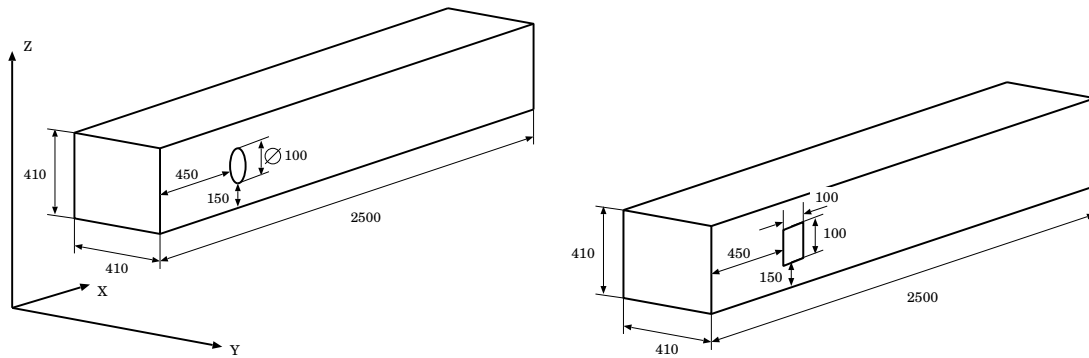


Abbildung 6.3: Geometrievarianten des durchströmten Kanals mit Kreiszylinder (links) oder Rechteckszylinder (rechts)

Die Validierungsrechnung gliedert sich in folgende zu berechnende Konfigurationen:

D3-Z1: Kreiszylinder mit $Re = 20$

D3-Q1: Rechteckszylinder mit $Re = 20$

D3-Z2: Kreiszylinder mit $Re = 100$

D3-Q2: Rechteckszylinder mit $Re = 100$

Weitere Parameter sind der Tabelle 6.2 zu entnehmen.

Zu berechnen sind dabei die folgenden Größen:

- Widerstands- und Auftriebskoeffizienten am Zylinder:

$$c_W = \frac{2 F_W}{\rho \bar{u} D H} \quad \text{und} \quad c_A = \frac{2 F_A}{\rho \bar{u} D H}$$

- Druckdifferenz ΔP an den zentralen vorderen und hinteren Staupunkten des Zylinders
- Für $Re = 100$: Strouhalzahl $Sr = \frac{D f}{\bar{u}}$ mit Ablösefrequenz f

Bezeichnung	Formelsymbol	Wert
Dichte	ρ	1 kg/m ³
Kinematische Viskosität	ν	0.001 m ² /s
Zylinderdurchmesser	D	0.1 m
Zylinderlänge/Kantenlänge Einströmfläche	H	0.41 m
Mittlere Einströmgeschwindigkeit	\bar{u}	0.2 / 1 m/s
Einströmprofil	$u(y, z)$	$36 \bar{u} y z (H - y)(H - z) / H^4$
Wandgeschwindigkeiten	\vec{u}_{Wand}	$\vec{0}$ m/s
Reynoldszahl	Re	20 / 100
Punktzahl D3Z1/2	$n_{P,Z}$	1024930
Punktzahl D3Q1/2	$n_{P,Q}$	1019428

Tabelle 6.2: Stoffdaten und Randbedingungen für die Zylinderumströmung

Abbildung 6.4 zeigt einen Schnitt durch eines der verwendeten Rechengitter. Die ebenfalls dargestellten Isolines der Längsgeschwindigkeit zeigen darüber hinaus, dass der Übergang zwischen zwei Gitterlevels relativ glatt bleibt.

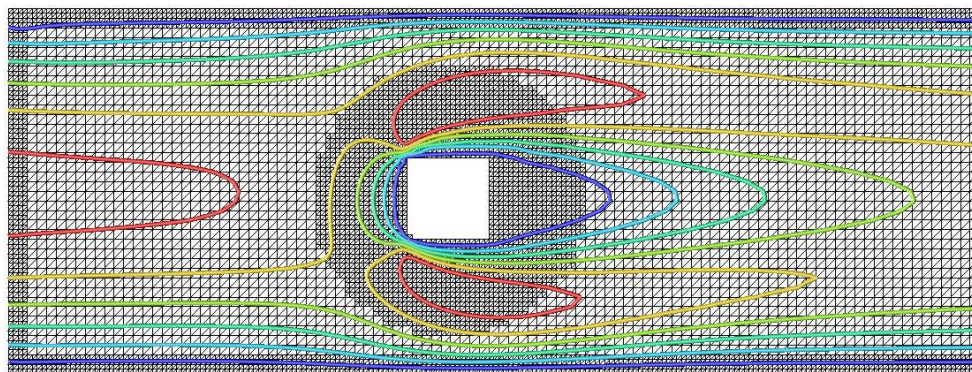


Abbildung 6.4: Schnitt durch ein Rechengitter im Bereich des Zylinders

Die Ergebnisse für die Fälle D3Z1 und D3Q1 sind in Tabelle 6.3 und 6.4 angegeben. Die Abbildungen 6.5 und 6.6 stellen die Längskomponente des Geschwindigkeitsfeldes in Form eines Isoplots dar.

Die Berechnung der Auftriebs- und Widerstandsbeiwerte c_A und c_W gestaltete sich schwierig. Die Ursache dafür lag im verwendeten Gittertyp. Da die kartesischen Gitter im Allgemeinen nicht randkonform zu erzeugen sind, ist insbesondere die Berechnung der Wandschubspannungen selbst beim Einsatz von Boundary-Fitting-Randbedingungen unsicher.

Vergleichsgröße	Berechnung	Referenzwerte
c_W	6.27	6.05 - 6.25
c_A	0.14	0.008 - 0.01
ΔP	0.16512 Pa	0.165 - 0.175 Pa

Tabelle 6.3: Ergebnisse für **D3Z1**

Vergleichsgröße	Berechnung	Referenzwerte
c_W	7.5836	7.5 - 7.7
c_A	0.8692	0.06 - 0.08
ΔP	0.17168 Pa	0.172 - 0.18 Pa

Tabelle 6.4: Ergebnisse für **D3Q1**

Die Konfigurationen D3Z1 und D3Q1 liefern als Ergebnis eine stationäre Strömung. Im Gegensatz dazu sind die Konfigurationen D3Z2 und D3Q2 instationär. Der Grund ist die erhöhte Einströmgeschwindigkeit. Die sich hinter dem Zylinder ausbildende Scherschicht wird instabil. Daher reicht eine kleine Störung in Form der leichten Asymmetrie der Geometrie, um eine instationäre, periodische Ablösung stromabwärts hinter dem Zylinder auszubilden. Diese periodische Ablösung wird als Karmann'sche Wirbelstraße bezeichnet (Abbildung 6.7). Aus diesem Grunde stellen die Konfigurationen D3Z2 und D3Q2 zusätzliche Anforderungen an die Zeitgenauigkeit des eingesetzten Lösungsverfahrens. Die zu ermittelnde Ablösefrequenz f und die daraus folgende Strouhalzahl Sr werden mit Referenzwerten aus [41] verglichen (Tabelle 6.5). Die gute Übereinstimmung mit den Referenzwerten bestätigt die Zeitgenauigkeit der LBGK-Methode.

Vergleichsgröße	Berechnung	Referenzwerte
Sr_{D3Z1}	0.31621	0.29 - 0.35
Sr_{D3Q1}	0.29326	0.28 - 0.35

Tabelle 6.5: Ergebnisse für periodische Testfälle **D3Z2** und **D3Q2**

6.2 Validierung des Partikeltransports

Das in dieser Arbeit verwendete Partikelmodell wurde in wesentlichen Teilen aus [25] übernommen. Lediglich die Verfolgung der Partikel durch das Rechengitter und damit die Ermittlung der Strömungsgrößen in Partikelnähe mussten auf den hier genutzten Gittertyp angepasst werden. Aus diesem Grunde kann auf eine Validierung des Modells in dieser Arbeit verzichtet werden.

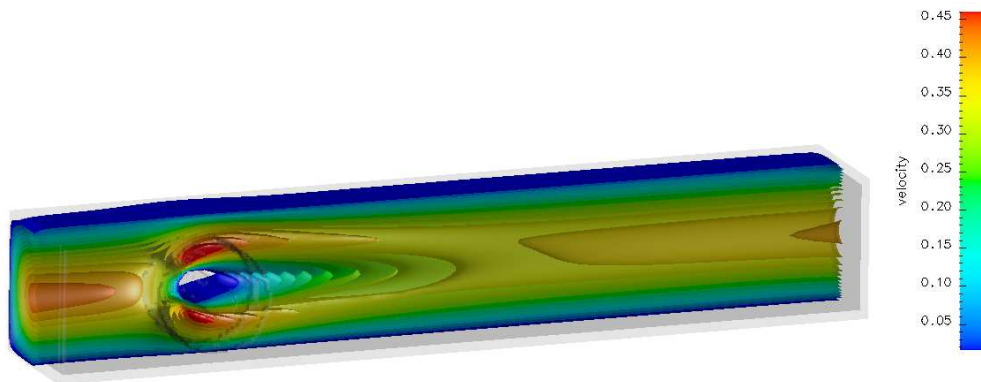


Abbildung 6.5: Längsgeschwindigkeit [m/s] für **D3Z1** als Isoflächen

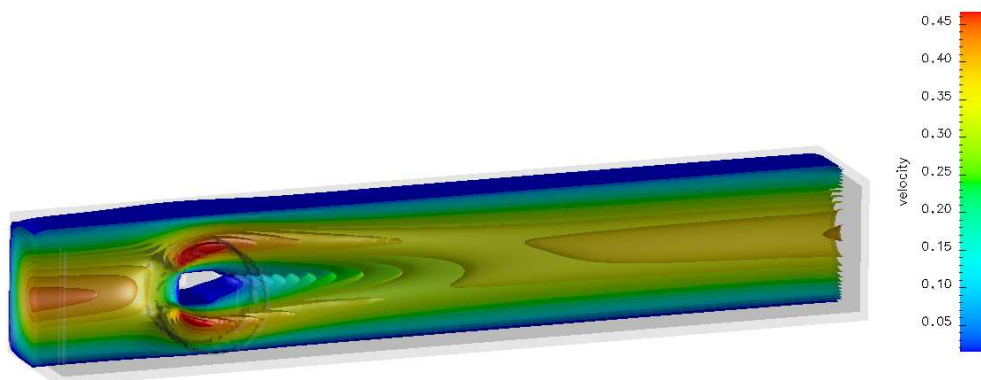


Abbildung 6.6: Längsgeschwindigkeit [m/s] für **D3Q1** als Isoflächen

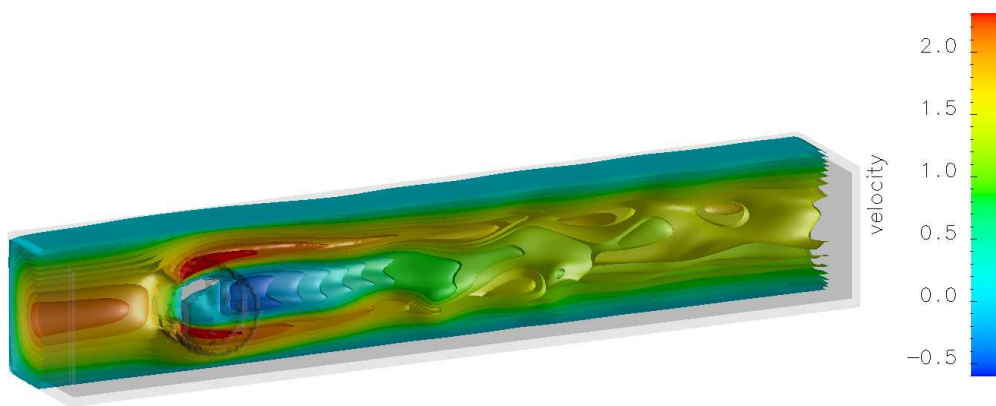


Abbildung 6.7: Längsgeschwindigkeit [m/s] für **D3Q2** als Isoflächen. Bei dieser Konfiguration entstehen periodische Ablösungen hinter dem Zylinder.

6.3 Validierung des Temperatur- und Wasserdampftransports

Zur Validierung des Transportmodells für Wärme- und Stoffübertragung in der Nase wurde die analytische Lösung der zweidimensionalen laminaren Grenzschichtgleichungen herangezogen. Die Platte ist beheizt bzw. gibt Wasserdampf an die darüber hinweg strömende Luft ab. Die analytische Lösung dieses Problems ist angelehnt an [1] und wird mit den erzielten numerischen Ergebnissen verglichen.

Der Wärmeübergang wurde anhand der Nusselt-Zahl Nu und im Falle des Stoffübergangs anhand der Sherwood-Zahl Sh verglichen. Beide sind Funktionen der Lauflänge x der Plattengrenzschicht. Die Dicke der Strömungsgrenzschicht ergibt sich in der analytischen Lösung der Grenzschichtgleichungen zu

$$\delta = 4.64 \frac{x}{Re_x^{1/2}}$$

mit der von der Lauflänge abhängenden Reynolds-Zahl $Re_x = \frac{u_\infty x}{\nu}$. Die Dicke der Temperaturgrenzschicht ist eine Funktion der Prandtl-Zahl Pr :

$$\delta_T = \delta \frac{0.976}{Pr^{1/3}}. \quad (6.2)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient kann mit Hilfe der Wärmeleitfähigkeit λ und der Grenzschichtdicke δ_T berechnet werden als

$$\alpha = -\lambda \frac{\partial T / \partial y}{T - T_\infty} = \frac{3}{2} \frac{\lambda}{\delta_T}. \quad (6.3)$$

Für die Nusselt-Zahl gilt die Definition

$$Nu = \frac{\alpha x}{\lambda}.$$

Sie ist ein Maß für das Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Wärmetransport. Durch Einsetzen der Beziehungen (6.2) und (6.3) ergibt sich für die Nusselt-Zahl die folgende analytische Lösung:

$$Nu = 0.331 Re_x^{1/2} Pr^{1/3}.$$

Die Nusselt-Zahl kann mit Hilfe der Gleichung (6.3) ebenfalls numerisch bestimmt werden.

Die analytische Behandlung der Stoffübertragung für die laminare Plattengrenzschicht erfolgt analog zur Wärmeübertragung. Für den Stoffübergangskoeffizienten β gilt ana-

log zu (6.3) die Beziehung

$$\beta = -D \frac{\partial \psi / \partial y}{\psi - \psi_\infty} = \frac{3}{2} \frac{D}{\delta_c}$$

für einen Massenbruch ψ , dem Diffusionskoeffizienten D und der Dicke δ_c der Konzentrationsgrenzschicht. Die Sherwood-Zahl Sh ist das Maß für das Verhältnis von konvektivem zu diffusivem Stofftransport:

$$Sh = \frac{\beta x}{D}.$$

Die analytische Lösung der Gleichungen für die Konzentrationsgrenzschicht führt damit auf die Beziehung

$$Sh = 0.331 Re_x^{1/2} Sc^{1/3}$$

mit der Schmidt-Zahl Sc .

Die Abbildungen 6.8 und 6.9 stellen die Verläufe für die Nusselt-Zahl Nu und die Sherwood-Zahl Sh sowohl für die analytische als auch die numerische Lösung dar. Die numerischen Berechnungen wurden mit dem LBGK-Verfahren und dem in Abschnitt 5.1 vorgestellten Differenzenverfahren durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung der dimensionslosen Kennzahlen.

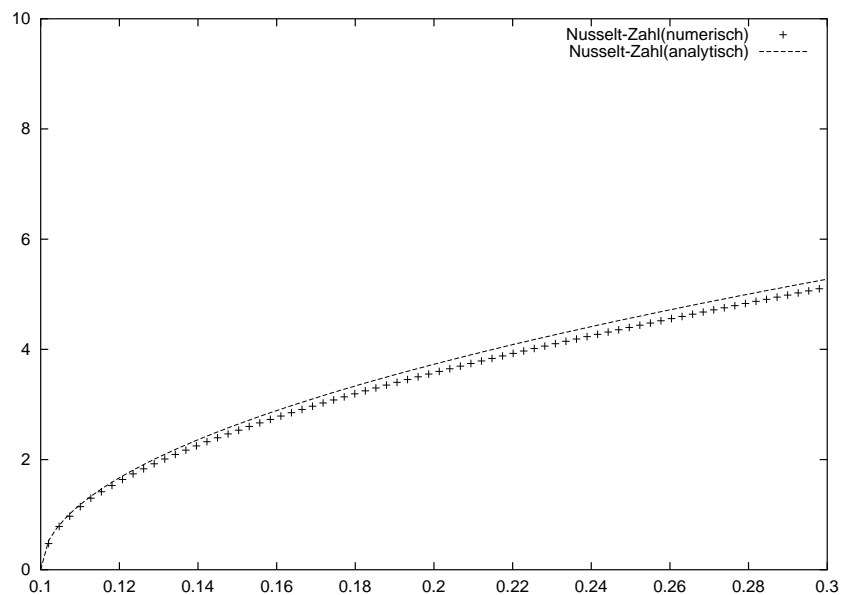


Abbildung 6.8: Verlauf der Nusselt-Zahl über die Lauflänge einer Plattengrenzschicht, Vergleich analytische und numerische Berechnung. Die Platte beginnt bei der dimensionslosen Koordinate $x = 0.1$.

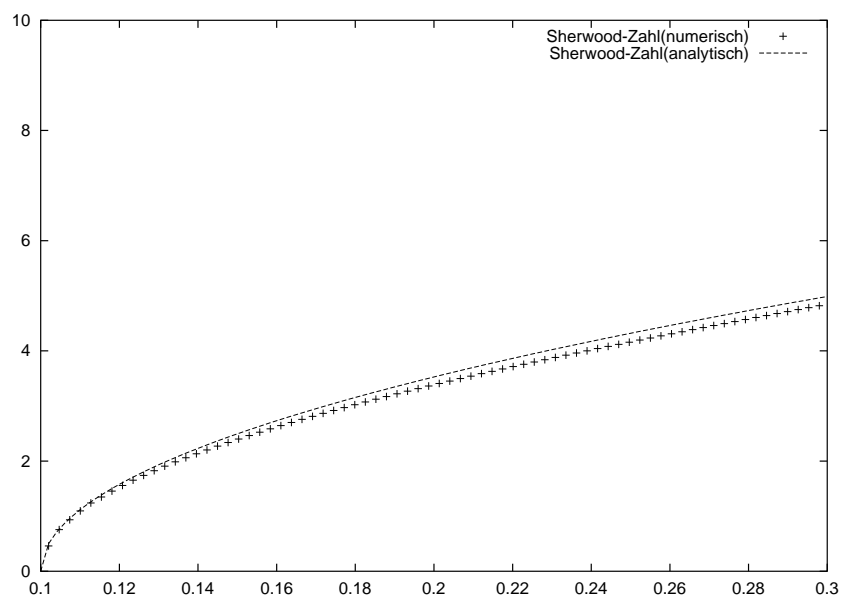


Abbildung 6.9: Verlauf der Sherwood-Zahl über die Lauflänge einer Plattengrenzschicht

Kapitel 7

Strömung durch ein Nasenmodell

7.1 Strömung durch ein Nasenmodell

Die in dieser Arbeit behandelte Problemstellung ist die einer Strömung durch ein Modell der Nasenhaupthöhle. Ziel ist es, die erarbeiteten Methoden und Transportmodelle an einer realistischen Strömungskonfiguration zu testen. Die Geometrie fand bereits Verwendung in [22] und [35] und kann sowohl zur Validierung durch Vergleich mit einer experimentellen Untersuchung als auch mit einem alternativen numerischen Verfahren (Kompressibler Navier-Stokes-Löser mit Finite-Volumen Diskretisierung, FVM) dienen. Die dabei erzielten Ergebnisse werden in [14] vorgestellt. Im nächsten Schritt sollen diese Methoden auf echte Nasengeometrien übertragen werden.

Die Strömung durch das Nasenmodell ist komplex, da die Geometrie nicht trivial ist und die auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten bzw. die Reynoldszahl für eine laminares, inkompressibles Lösungsverfahren relativ groß sind. Im Falle des stationären Einatmens wurde beispielsweise eine Reynoldszahl von $Re = 1000$ angesetzt, bezogen auf die halsseitige Rohrgeometrie. In technischen Rohrströmungen gilt als Richtwert für das Erscheinen von ersten turbulenten Effekten ein Wert von $Re = 2300$. Dieser ist jedoch stark abhängig von den Randbedingungen, z.B. dem Einströmprofil, sowie von störenden Einflüssen der Geometrie (z.B. rauhe Wände, Ablösegebiete). Da in der vorliegenden Konfiguration ausschließlich laminare Einströmprofile Verwendung finden, sind turbulente Effekte hier nicht zu erwarten. Realistischere Konfigurationen, insbesondere bei höheren Reynoldszahlen, bringen jedoch möglicherweise turbulente Effekte hervor (Transition). Zusätzlich erschwerend vor allem für das angewendete LBGK-Verfahren mit seinen kartesischen Gittern fallen die zahlreichen Querschnittsverengungen und die damit verbundene konvektive Beschleunigung der Strömung ins Gewicht. An solchen Stellen treten große Geschwindigkeitsgradienten auf, für deren Auflösung anisotrope Gitterelemente am günstigsten sind.

7.2 Geometrie und Rechengitter

Aufgrund von Symmetrieeigenschaften wird die Nasenhaupthöhle im ersten Ansatz als Halbmodell ausgeführt. Als Symmetrieebene dient dabei die Nasenscheidewand. Abbildung 7.1 zeigt dieses Halbmodell von Vorder- und Rückseite. Sowohl Naseneintritt als auch der Übergang zur Luftröhre wurden wie im Experiment mit Hilfe von Kreisrohren künstlich verlängert. Dadurch kann der Eintrittsvolumenstrom sowohl beim Ein- als auch beim Ausatmen als Parabelprofil vorgeschrieben werden. Die Nasenmuscheln und die im Bereich des Eintritts liegende Nasenklappe wurden nachmodelliert.

Das Modell wurde mit Hilfe eines Computertomographen digitalisiert und in ein Oberflächenmodell überführt. Davon ausgehend kann nach Kapitel 3 ein Volumengitter generiert werden. In [22] wurde dagegen ein blockstrukturiertes Volumengitter erzeugt. Das endgültige und für alle nachfolgend beschriebenen Konfigurationen funktionsfähige LBGK-Gitter umfasst etwa 4.7 Mio. Punkte und wurde zur Parallelisierung in 16 Einzelgebiete zerlegt.

7.3 Stationäres Ein- und Ausatmen

Der Vergleich der beiden numerischen Verfahren erfolgt vereinfacht anhand der stationären Ein- und Ausatemprozesse, obwohl der Atemvorgang normalerweise alles andere als stationär ist. Die Atemfrequenz und die daraus folgende Strouhalzahl werden jedoch als klein angenommen, um einen quasistationären Ansatz zu rechtfertigen.

Die Randbedingungen für beide Konfigurationen sind in Tabelle 7.1 aufgelistet. Die Reynoldszahlen sind dabei einheitlich auf die Größen am halsseitigen Rand bezogen. Die angegebenen Geschwindigkeiten sind jeweils über den Rohrquerschnitt gemittelt. Die Reynoldszahl und damit der Volumenstrom wurde beim Ausatemvorgang kleiner gewählt als beim Einatmen, analog zum natürlichen menschlichen Atemzyklus.

Die beiden Methoden wurden anhand von ausgewählten Geschwindigkeitsprofilen sowie dem integralen Druckverlustbeiwert verglichen. Dieser ist definiert als

$$\zeta = \frac{\Delta P_t}{\frac{1}{2} \rho u_{\text{ein}}^2}.$$

Dabei bezeichnet ΔP_t den Totaldruckverlust zwischen Eintritts- und Austrittsquerschnitt und u_{ein} die mittlere Geschwindigkeit am jeweiligen Eintritt. Tabelle 7.2 zeigt die dabei erzielten Werte. Der Vergleich dieser Ergebnisse zeigt die gute Übereinstimmung der beiden Methoden. Es wurden darüber hinaus die statischen Druckverluste ΔP zwischen den beiden Querschnitten in die Tabelle aufgenommen.

Die Strömungsgeschwindigkeiten in ausgewählten Querschnitten sind in den Abbildungen 7.3 und 7.4 dargestellt. Die Stromlinien der beiden Konfigurationen sind in Abbildung 7.5 und 7.6 dargestellt. Deutlich zu erkennen ist der Wirbel, der sich beim

Bezeichnung	Formelsymbol	Wert
Dichte	ρ	1.205 kg/m ³
Kinematische Viskosität	ν	1.35 · 10 ⁻⁵ m ² /s
Halsseitiger Rohrdurchmesser	D	12 mm
Halsseitige Strömungsgeschwindigkeit, Einatmen	$u_{\text{ref,ein}}$	1.125 m/s
Volumenstrom, Einatmen	\dot{V}_{ein}	8.48 l/min
Reynoldszahl, Einatmen	Re_{ein}	1000
Halsseitige Strömungsgeschwindigkeit, Ausatmen	$u_{\text{ref,aus}}$	0.88875 m/s
Volumenstrom, Ausatmen	\dot{V}_{aus}	6.6992 l/min
Reynoldszahl, Ausatmen	Re_{aus}	790
Eintrittsprofil	$\vec{u}(r)$	Parabolisch
Wandgeschwindigkeit	\vec{u}_{Wand}	$\vec{0}$ m/s

Tabelle 7.1: Randbedingungen für den stationären Ein-/Ausatemprozess

Konfiguration	ζ , LBGK	ζ , FVM	relative Abweichung	ΔP
Einatmen	2.99270	3.0059	0.4423%	3.17525 Pa
Ausatmen	5.34597	5.4796	2.4361%	2.77437 Pa

Tabelle 7.2: Druckverlustkoeffizienten, Vergleich der Berechnungsmethoden

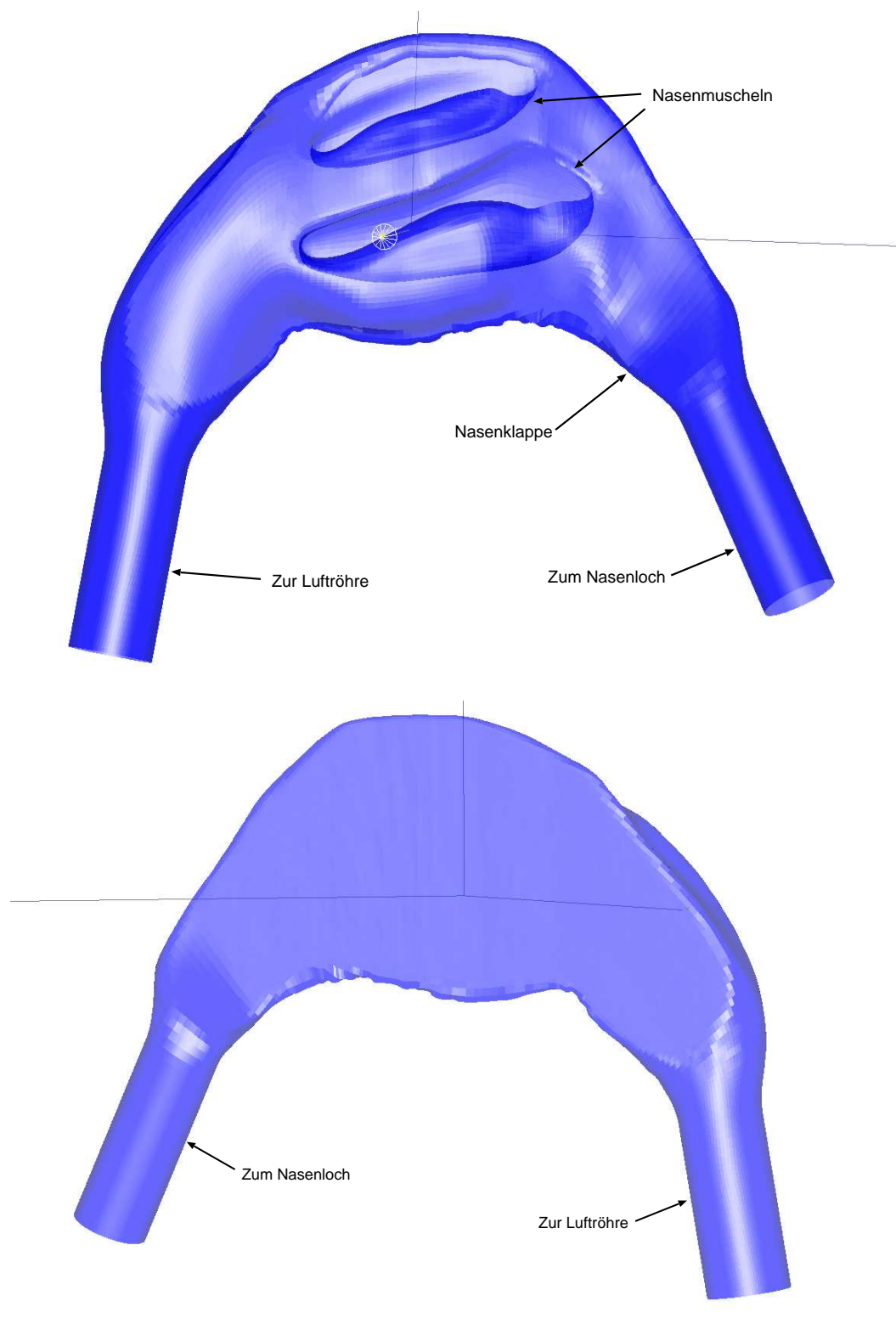


Abbildung 7.1: Künstliches Halbmodell der Nasenhaupthöhle mit Ansicht der Nasenschwämme (oben) und der Nasenscheidewand (unten)

Einatemvorgang zwischen den Nasenmuscheln bildet. Insgesamt wirken die Stromlinien beim Ausatmen „geordneter“, d.h. die Strömung wird weniger verdrallt und es bilden sich weniger Ablösegebiete.

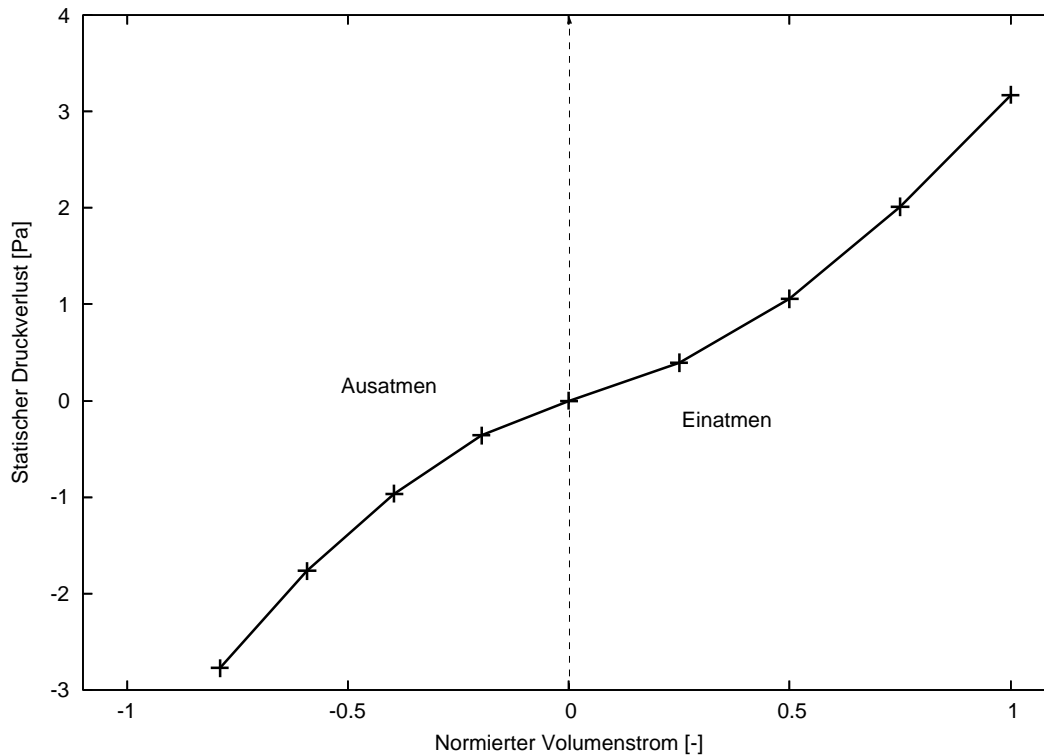


Abbildung 7.2: Statischer Druckverlust ΔP , aufgetragen über einen normierten Volumenstrom. Negative Werte kennzeichnen den Ausatemvorgang.

Es wurden weitere stationäre Konfigurationen mit verschiedenen Volumenströmen berechnet, um einen vollständigen quasistationären Atemzyklus abzudecken. Der jeweils resultierende statische Druckverlust wurde in Abbildung 7.2 über den mit $\dot{V}_{\max} = 8.481/\text{min}$ normierten Volumenstrom aufgetragen. Erwartungsgemäß steigt der Druckverlust deutlich überproportional zum Volumenstrom an. Daraus kann gefolgert werden, dass konvektive, nichtlineare Effekte in der Strömung eine dominierende Rolle spielen. Beispielhaft dafür sind Ablösegebiete, die insbesondere im Bereich von Querschnittserweiterungen oder an der stromabgewandten Seite der Nasenmuscheln auftreten.

Leider stellte sich heraus, dass der LBGK-Algorithmus in der beschriebenen Form nicht gut geeignet ist, um noch größere Volumenströme zu simulieren. Umgekehrt konnten die oben beschriebenen Konfigurationen nicht auf einem gröberen Gitter nachvollzogen werden. So weist der Einatemvorgang bei maximalem Volumenstrom einen sehr großen Wert für den Relaxationsparameter von $\Omega > 1.97$ (Gleichung 2.53) auf. Damit bewegt sich das Verfahren an seiner Stabilitätsgrenze. Weder die Anwendung von lokalen Dämpfungstermen (Abschnitt 2.5.2) noch eine globale Begrenzung für Ω erzielten

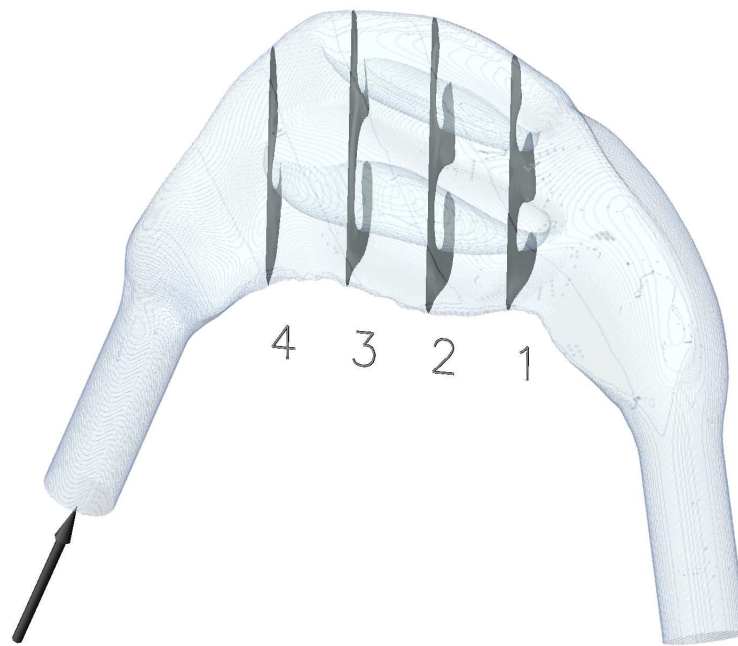


Abbildung 7.3: Transparente Hülle mit Querschnitten

befriedigende Resultate; in allen Fällen wurde die Rechnung entweder instabil oder der errechnete Druckverlust wurde zu hoch. Diese Situation verschärfte sich noch beim Einsatz lokaler Gitterverfeinerung. In solchen Fällen musste der maximal mögliche Wert für Ω noch weiter reduziert werden. Die einzige Abhilfe konnte durch eine globale Gitterverfeinerung erzielt werden. Diesem Vorgehen sind natürlich enge Grenzen gesetzt. Aufgrund der komplexen Geometrie ist es unmöglich, alle Stellen mit großen Geschwindigkeitsgradienten vorab zu erkennen und lokal zu verfeinern. Deshalb ist nach Ansicht des Autors eine dynamische Gitteradaption bei der Strömungsberechnung in der Nase unerlässlich. Ein solches Konzept in Verbindung mit lokalen Dämpfungstermen scheint erfolgversprechend. Der Implementierungsaufwand für so ein adaptives Vorgehen ist gerade in einem parallelisierten numerischen Lösungsverfahren erheblich.

7.4 Instationäres Ein-/Ausatmen

Die LBGK-Methode eignet sich auch für die Simulation von instationären Vorgängen, da sie ohne Modifikationen von 2. Ordnung zeitgenau ist. Dabei wird ein zeitlich veränderlicher Volumenstrom mit Hilfe eines periodischen Ansatzes vorgeschrieben:

$$\dot{V} = \dot{V}_{\max} \sin 2\pi t f_a.$$

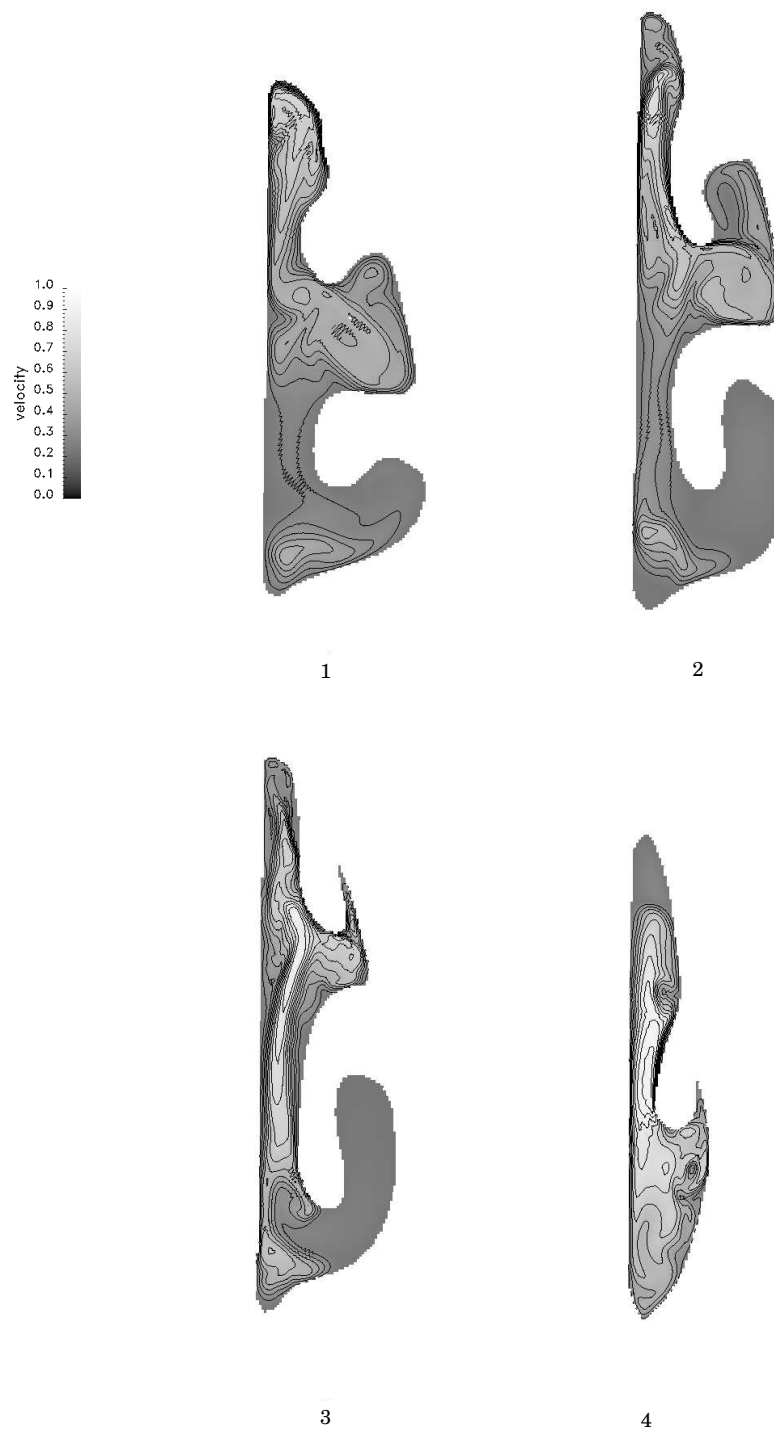


Abbildung 7.4: Isolinien der Geschwindigkeit [m/s]

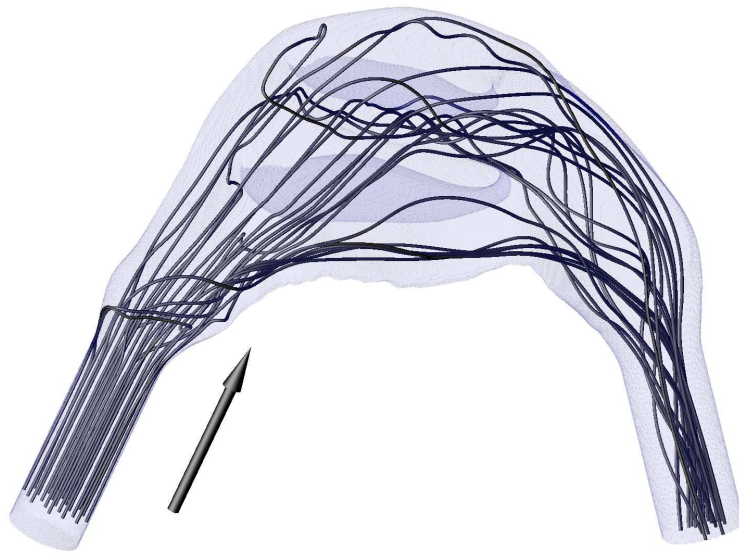


Abbildung 7.5: Stromlinien des stationären Einatemvorganges. Der Pfeil zeigt die Hauptströmungsrichtung an.

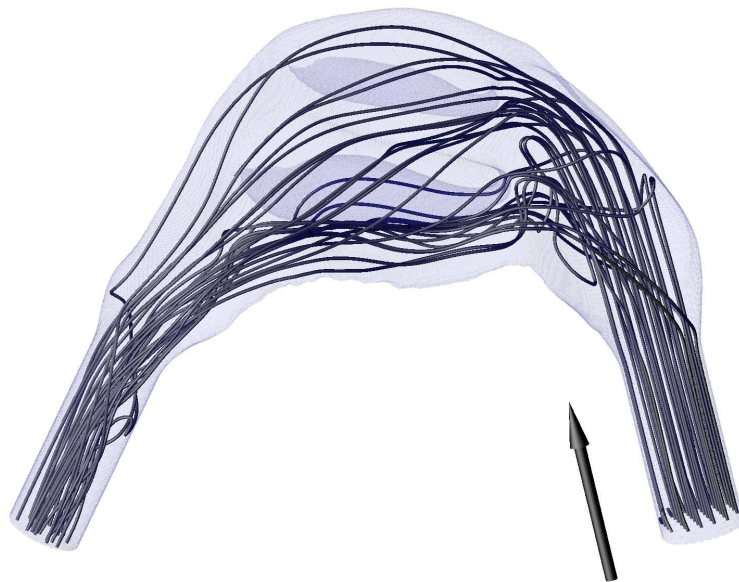


Abbildung 7.6: Stromlinien des stationären Ausatemvorganges

Die Atemfrequenz wird mit $f_a = 1 \text{ s}^{-1}$ angenommen. Mit den halsseitigen Referenzwerten $u_{\text{Hals}} = 1.125 \text{ m/s}$ und dem Durchmesser $D = 12 \text{ mm}$ ergibt sich damit eine Strouhalzahl von $Sr = D f_a / u_{\text{Hals}} = 0.01067$, ein relativ kleiner Wert trotz der hoch angesetzten Atemfrequenz. Der maximale Volumenstrom \dot{V}_{max} beträgt analog zu den stationären Prozessen 8.48 l/min beim Einatmen bzw. 6.69921 l/min beim Ausatmen. Ein betragsmäßig positiver Volumenstrom bezeichnet hier den Einatemvorgang, ein negativer Volumenstrom den Ausatemvorgang.

Der Volumenstrom wird am jeweiligen Einströmrand durch ein Parabelprofil vorgegeben; bei Umkehr der Strömungsrichtung sind damit wechselweise das Nasenloch oder der Übergang zur Luftröhre (Halsseite) Einströmrand. Am Austritt wird der Druck über einen Relaxationsansatz berechnet, um während der Stromumkehr möglichst stetige Druckveränderungen an den durchströmten Rändern zu erhalten. Die Formel für den Relaxationsansatz lautet

$$P = \left(1 - \frac{\dot{V}}{\dot{V}_{\text{max}}}\right) P_{\text{in}} + \frac{\dot{V}}{\dot{V}_{\text{max}}} P_{\text{a}}.$$

P_{a} kennzeichnet den Umgebungsdruck, P_{in} wird aus dem Rechengebiet extrapoliert. Es wurden drei Ein-/Ausatemzyklen simuliert. Die Auswertung der Geschwindigkeitsfelder bestätigte nachträglich die Annahme der quasistationären Modellströmung (Abschnitt 7.3), da Stromlinien- und Schnittbilder optisch nicht von analogen quasistationären Ergebnissen zu unterscheiden sind. Die instationäre Strömungssimulation dient jedoch als Basis für die Modellierung des Partikeltransports in der Nase, welcher Gegenstand des nächsten Abschnitts ist.

7.5 Partikeltransport in der Nase

Die menschliche Nase ist ein effektiver Filter, der verhindert, dass Staub- und Aerosolpartikel über die Atemluft ungehindert bis zur Lunge vordringen. Die sich dabei abspielenden Transportvorgänge können effektiv mit dem in Abschnitt 5.2 vorgestellten Partikelmodell simuliert werden. Die Partikel werden von der Luftströmung transportiert und können durch Trägheits- oder Schwerkraftwirkung mit der Nasenschleimhaut kollidieren. Dort werden sie auf einem zähflüssigen Sekret abgeschieden. Die vom Sekret bedeckten Flimmerhärchen transportieren die Fremdkörper letztendlich aus dem Körper. Das eingesetzte Modell ist gut geeignet für sphärische Partikel in einer Größenklasse von $d_P = 1 - 15 \mu\text{m}$. In dieser Größenordnung sind z.B. Pollen, Feinstäube, zerstäubte Flüssigkeitsteilchen usw. zu finden.

Der Partikeltransport wurde sowohl in einer stationären als auch in einer instationären Strömung (instationärer Ein-/Ausatemvorgang) simuliert [13]. In beiden Fällen wurde eine Anzahl von Partikeln am Naseneintritt vorgegeben. Im stationären Fall wird die Simulation so lange durchgeführt, bis nahezu alle Partikel entweder abgeschieden sind

oder die Nase in Richtung Lunge verlassen haben. Im Falle der instationären Rechnung wurden drei Atemzyklen simuliert. Kurz nach Beginn des zweiten und des dritten Zyklus wurden die Partikel hinzu gegeben.

In beiden Konfigurationen kann die Filterwirkung der Nase durch den Filterwirkungsgrad bemessen werden. Der Filterwirkungsgrad ist definiert zu

$$\eta_d = \frac{n_{P, \text{ in}}}{n_{P, \text{ d}}}. \quad (7.1)$$

Dabei bezeichnet $n_{P, \text{ in}}$ die Anzahl der eingestreuten und $n_{P, \text{ d}}$ die Zahl der deponierten Partikel. Eine typische Größenordnung ist $n_{P, \text{ in}} = 10000$. Es wurden Partikel der Größen $1 - 15 \mu\text{m}$ bei einer Dichte von $\rho_P = 1000 \text{ kg/m}^3$ und in der Größe $1 - 10 \mu\text{m}$ bei einer Dichte von $\rho_P = 10000 \text{ kg/m}^3$ simuliert. Diese Dichten entsprechen ungefähr den Größenordnungen für Aerosole bzw. Feststoffen. Die verschiedenen Einflussparameter für das Depositionsverhalten der Partikel wurden mit Hilfe der Stokes-Zahl Stk (Gleichung 5.9) zusammengefasst. Die darin enthaltene Reynolds-Zahl wird dabei aus den halsseitigen Strömungsgrößen bei maximalem Volumenstrom gebildet, also $Re = 1000$. Abbildung 7.7 zeigt den Filterwirkungsgrad in Abhängigkeit der Stokes-Zahl sowohl für stationäre wie für instationäre Durchströmung. Die Abbildungen 7.8 und 7.9 zeigen die Depositionsorte von Partikeln mit $d_P = 10 \mu\text{m}$ und $\rho_P = 10000 \text{ kg/m}^3$ für stationäres bzw. instationäres Atmen.

Aus den Ergebnissen wird ersichtlich, dass das zeitliche Verhalten der Luftströmung keinen großen Einfluss auf den integralen Filterwirkungsgrad besitzt. Die Stokes-Zahl ist die bei weitem wichtigste Einflussgröße. Ebenfalls wird deutlich, dass die Wirksamkeit der Nase als Filter für kleine Stokes-Zahlen ($Stk \leq 0.01$), d.h. kleine Radien und kleine Dichten des Partikelmaterials, eingeschränkt ist. Feststoffpartikel in einer Größenordnung von $d_P \leq 3 \mu\text{m}$ werden beispielsweise nur schlecht gefiltert; der Wirkungsgrad beträgt weniger als 20 %.

Ursache für dieses Verhalten ist die Tatsache, dass kleine und leichte Partikel den Stromlinien viel besser folgen und daher nur im Bereich von Staupunkten auf die Wand treffen. Umgekehrt werden große, schwere Partikel aufgrund ihrer Massenträgheit weniger von der Strömung beeinflusst und damit eher abgeschieden. Die Wirkungsgradkurve steigt deshalb im Bereich großer Partikeldurchmesser stark an. Feststoffpartikel mit $d_P = 10 \mu\text{m}$ werden beispielsweise mit einem Wirkungsgrad von über 85 % abgeschieden.

Während der integrale Wirkungsgrad vergleichsweise unabhängig vom Zeitverhalten der Strömung ist, zeigen sich einige Unterschiede bei den Depositionsorten der Partikel. In der stationären Konfiguration schlagen sich viele Partikel im Bereich der Nasenklappe und den Staupunkten der Nasenmuscheln nieder. Im Instationären verteilen sich mehr Partikel über die gesamte Nasenhaupthöhle und es kommt zu Abscheidungen im Bereich des Nasenrachens am Übergang zur Luftröhre.

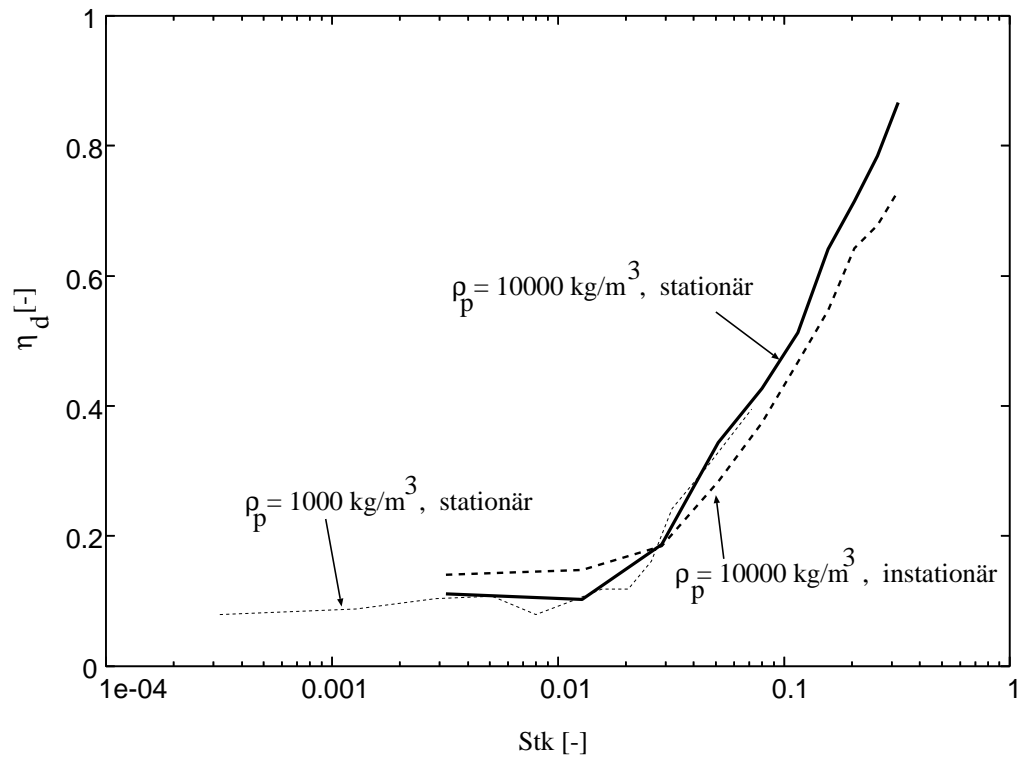


Abbildung 7.7: Filterwirkungsgrad über die Stokes-Zahl für Partikel verschiedener Dichte, stationäre und instationäre Strömung



Abbildung 7.8: Depositionsorte von Partikeln mit $d_P = 10 \mu\text{m}$ und $\rho_P = 10000 \text{ kg/m}^3$ nach dem stationären Einatemvorgang

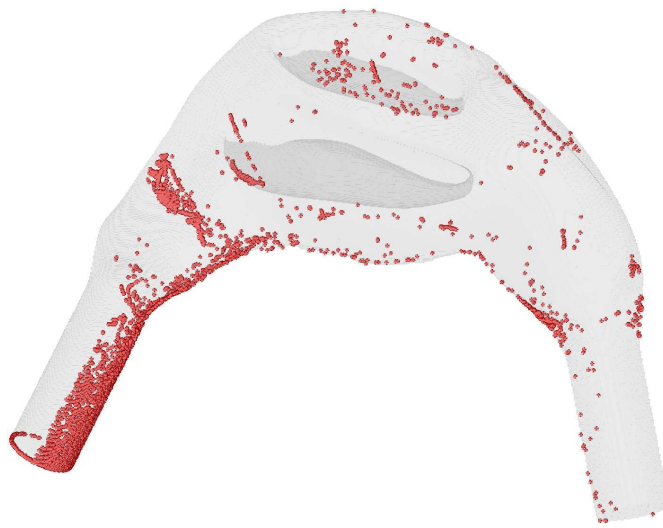


Abbildung 7.9: Depositionsorte von Partikeln mit $d_P = 10 \mu\text{m}$ und $\rho_P = 10000 \text{ kg/m}^3$ nach zwei instationären Atemzyklen

7.6 Resultate des Wärme- und Stofftransports

Neben der Filtration stellt die Klimatisierung, d.h. Erwärmung und Befeuchtung der Atemluft, eine weitere wichtige Funktion der Nase dar. Die Nase ist ein sehr guter Wärmetauscher. Experimentelle und klinische Untersuchungen belegen, dass die Nase bereits nach wenigen Atemzyklen in der Lage ist, Atemluft mit einer Temperatur von -20°C auf Körpertemperatur zu erwärmen und zu befeuchten. Die dabei ablaufenden physiologischen Vorgänge sind sehr komplex. Die Nase ist in der Lage, sich auf unterschiedliche Umgebungsbedingungen einzustellen; so ist z.B. bei Probanden in kalter Umgebung bedingt durch Erweiterung der Blutgefäße in der Nasenschleimhaut ein Anschwellen der Nasenmuscheln zu beobachten.

Weiterhin dürften bei der Erwärmung der Atemluft im dargestellten Fall Durchmischungseffekte eine Rolle spielen, die durch das periodische Zeitverhalten der Atmung ausgelöst werden. Eine ähnliche Erwärmungsleistung ist aus Sicht des Autors im Falle einer stationären Durchströmung nicht zu erwarten.

Die Befeuchtung der Atemluft ist eine weitere Aufgabe der Nasenschleimhaut. Das dazu notwendige Wasser wird durch Transpiration zur Verfügung gestellt. Völlig ungeklärt ist dabei die Wechselwirkung zwischen Schleimhaut und umgebender Luft, die die Randbedingungen des Problems bestimmen. Hier besteht dringender Forschungsbedarf. Die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen dürfen nur als außerordentlich grobe Modellierungen betrachtet werden. Die Fragestellung zielt vielmehr darauf ab, was die Nase leisten müsste, um die Atemluft im Falle eines stationären Einatemvorganges bei moderaten Umgebungsbedingungen bestmöglich zu klimatisieren. Die daraus folgenden Annahmen für die Transportmodelle und Randbedingungen wurden bereits in Abschnitt 5.1 vorgestellt. Die verwendeten Stoffdaten sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst.

Bezeichnung	Formelsymbol	Wert
Dichte	ρ	1.2 kg/m^3
Spezifische Wärmekapazität trockener Luft	$c_{p,L}$	1005 J/kgK
Wärmeleitungskoeffizient trockener Luft	λ	0.02569 W/mK
Diffusionskoeffizient Luft/Wasserdampf	D_{AB}	$2.6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

Tabelle 7.3: Stoffdaten für Luft/Wasserdampfgemisch

Es wird angenommen, dass die Nase optimal durchblutet ist und damit überall an der Wand die Körpertemperatur von $T|_{\text{Wand}} = 37^{\circ}\text{C}$ vorherrscht. Weiterhin soll die Nase in der Lage sein, die Luft in unmittelbarer Wandnähe vollständig mit Wasser zu sättigen; dies bedeutet, dass die Nasenschleimhaut weder auskühlen noch austrocknen kann. Bei einem Umgebungsdruck von $P = 1 \text{ bar}$ und einem Sattdampfdruck $P_{WS} = 0.062876 \text{ bar}$

ergibt sich damit ein Wassergehalt von

$$x_S = \frac{m_W}{m_L} = 0.622 \frac{P_{WS}}{P/\varphi - P_{WS}} = 0.041732.$$

bei einer relativen Feuchte von $\varphi = 100\%$. Mit den Definitionen

$$\psi_L = \frac{1}{1 + x_S} \quad \text{und} \quad \psi_W = \frac{x_S}{1 + x_S}$$

für die Luft- bzw. Wassermassenbrüche erhält man die Zahlenwerte

$$\psi_L|_{\text{Wand}} = 0.959940 \quad \text{und} \quad \psi_W|_{\text{Wand}} = 0.040060.$$

Die Wahl von Temperatur und relativer Luftfeuchte am Naseneintritt erfolgte in Analogie zu [23]. Die Eintrittstemperatur beträgt hier $T|_{\text{Eintritt}} = 25^\circ\text{C}$, die Luftfeuchte $\varphi = 35\%$. Damit ergeben sich die folgenden Zahlenwerte:

$$\psi_L|_{\text{Eintritt}} = 0.993061 \quad \text{und} \quad \psi_W|_{\text{Eintritt}} = 0.006939.$$

Am Austritt werden Temperatur und Massenbrüche extrapoliert.

Die Berechnungsergebnisse sind in den Abbildungen 7.10 und 7.11 als Temperatur- und Feuchtigkeitsverläufe (relative Feuchte φ) entlang eines durch die Nase verlaufenden Messpfades dargestellt. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass die Atemluft am Ende der Messstrecke nahezu auf 37°C erwärmt und mit Wasser gesättigt ist ($\varphi = 100\%$). Dieser Zustand wird im wesentlichen schon nach einem Drittel der Strecke, die die Luft in der Nase zurücklegt, erreicht.

Die von der Nase aufgebrachte Energie sowie der Wassermassenstrom, der über die Schleimhaut an die Atemluft abgegeben wird, können durch Bilanzierung nach der Massen- und Energieerhaltung an Ein- und Austritt ermittelt werden. Bei einem Luftvolumenstrom $\dot{V} = 8.481/\text{min}$ und einer Dichte von $\rho = 1.2\text{ kg/m}^3$ ergibt sich ein Luftmassenstrom von $\dot{m}_{\text{Luft}} = 0.010176\text{ kg/min}$. Mit den errechneten Werten für die Massenbrüche bzw. der Wasserbeladung ergibt sich als Differenz zwischen Naseneintritt und -Austritt ein Wasservolumenstrom von

$$\Delta\dot{m}_{\text{Wasser}} = 3.379 \cdot 10^{-4}\text{ kg/min}.$$

Unter der Annahme, dass Ein- und Ausatemvorgang die nahezu gleiche Zeit in Anspruch nehmen, kann der tägliche Wasserverlust über die Nasenschleimhaut abgeschätzt werden zu

$$\dot{m}_{\text{Verlust}} = \Delta\dot{m}_{\text{Wasser}} \cdot 720\text{ min/Tag} = 0.243\text{ kg/Tag}.$$

Dies entspricht ungefähr dem Inhalt einer Tasse Wasser. Dabei muss beachtet werden,

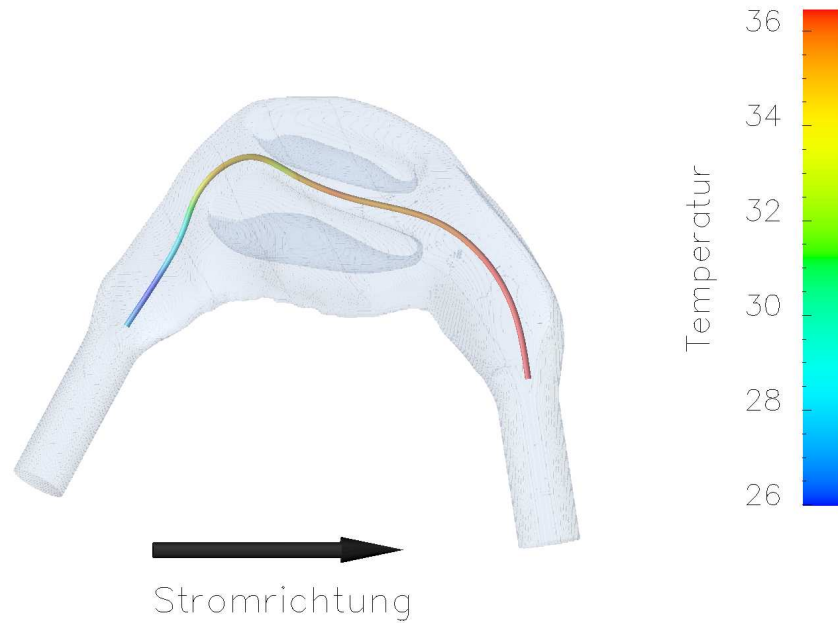


Abbildung 7.10: Messpfad durch die Nasenhöhle mit aufgetragener Temperatur in °C

dass das Nasenmodell nur halbseitig ausgeführt ist.

Mit Hilfe der Temperaturzunahme kann die von der Nase aufzubringende Leistung berechnet werden, die der Klimatisierungsprozess benötigt. Dabei ist auch die Verdampfungsenthalpie des Wassers zu berücksichtigen. Es wird angenommen, dass das Wasser zunächst in flüssiger Form als Film auf der Nasenschleimhaut vorliegt und bei Kontakt mit der Umgebung verdampft, um die Luft in unmittelbarer Wandnähe sofort zu sättigen. Die dazu notwendige Energie muss von der Nase erbracht werden, um ein Auskühlen der Schleimhaut durch Verdunstungskälte zu verhindern.

Die spezifische Enthalpie feuchter Luft kann bekanntlich über folgende Formel ausgedrückt werden:

$$h_{1+x} = c_{p,L} \cdot T + x_S \cdot (c_{p,WD} \cdot T + r)$$

Die Werte für die spezifischen Wärmekapazitäten von Luft und Wasserdampf $c_{p,L}$ und $c_{p,WD}$ sowie für die Verdampfungsenthalpie r lauten unter Normalbedingungen

$$c_{p,L} = 1.005 \frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}, \quad c_{p,WD} = 1.89 \frac{\text{kJ}}{\text{kg K}} \quad \text{und} \quad r = 2500.5 \frac{\text{kJ}}{\text{kg K}}.$$

Die spezifische Enthalpie an Nasen- und Halsseite hängt damit von den bekannten Größen für Temperatur und Wasserbeladung ab. Zusammen mit dem Luftmassenstrom



Abbildung 7.11: Temperatur- ($^{\circ}\text{C}$) und relativer Feuchteverlauf (%) über die Bogenlänge des Messpfades

\dot{m}_{Luft} ergibt sich damit eine Leistungsabgabe von

$$\dot{Q} = 0.9808 \text{ kJ/min} = 16.35 \text{ W}$$

beim Einatemvorgang. Zum Vergleich: Eine moderne CPU benötigt unter Volllast eine Leistung von etwa 80 W.

Die erzielten Ergebnisse für Wasserverlust und Leistungsabgabe infolge des Einatemprozesses sind mit Sicherheit im Vergleich zu den realen Verhältnissen zu hoch. Der Grund dafür sind die zahlreichen Modellfehler wie die Annahme einer stationären Einatmung oder die perfekte Klimatisierung wandnaher Zonen durch die Nasenschleimhaut. Sie erlauben dennoch eine Abschätzung dessen, was die Nase für die Klimatisierung leisten muss.

Die Simulation des Ausatemvorganges ist mit den getroffenen Modellannahmen nicht sinnvoll, da Luft aus der Lunge nahezu Körpertemperatur besitzt und mit Wasser gesättigt ist. Damit sind die Eintrittsbedingungen die gleichen wie an den Wänden der Nasenhöhle, sodass sich als stationäres Ergebnis ein homogenes Feld einstellt. Mit dieser Annahme ist es zudem ausgeschlossen, dass die im Einatemvorgang aufgewendete Energie oder das Wasser zurückgewonnen werden kann.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Thema dieser Arbeit ist die Simulation der Strömung durch die menschliche Nasenhaupthöhle unter Verwendung von Lattice-Boltzmann-Methoden in der Variante Lattice-BGK (LBGK). Der Schwerpunkt liegt hierbei hauptsächlich auf der Entwicklung und Bereitstellung von Methoden, die später im klinischen Betrieb zum Einsatz kommen sollen. Unter diesem Aspekt war es nicht notwendig, die Durchströmung von tatsächlichen Geometrien der menschlichen Nase zu simulieren. Vielmehr stand die Erprobung der Methoden anhand eines Modells der Naseninnengeometrie im Vordergrund, sodass eine ausreichende Validierung möglich gemacht wurde. Als Referenz dienten dabei die Finite-Volumen Berechnungen von [22] am Aerodynamischen Institut der RWTH Aachen, flankiert von experimentellen Ergebnissen [35].

Die sehr unterschiedlichen numerischen Methoden lieferten übereinstimmende Ergebnisse für die Simulation von stationären Atemvorgängen. Diese Ergebnisse wurden in [14] publiziert. Die Arbeitsgruppe am Aerodynamischen Institut hat zudem weitere Untersuchungen angestellt, in denen z.B. größere Volumenströme oder vollständig instationäre Ein-/Ausatemzyklen simuliert wurden.

Das in dieser Arbeit genutzte LBGK-Verfahren erwies sich leider in der vorliegenden Form als nicht geeignet, alle diese Konfigurationen nachzuvollziehen. Hintergrund sind die dabei auftretenden großen Reynoldszahlen, die das Verfahren bei begrenzter numerischer Auflösung über seine Stabilitätsgrenze treiben. Der Versuch, das Verfahren mit Hilfe von künstlicher Dämpfung zu stabilisieren, brachte nur bedingten Erfolg. Der Autor ist der Auffassung, dass dieses Problem durch eine dynamische Gitterverfeinerung (AMR) zumindest gemildert werden kann, da die Ursache nicht allein in der verwendeten Lösungsmethode, sondern auch im Gittertyp zu suchen ist. Die Schwierigkeiten, die die Implementierung einer solchen dynamischen Verfeinerung mit sich bringt, sind in einem parallelen Programm – die stationären Rechnungen beispielsweise wurden auf einem PC-Cluster mit 16 Knoten erzeugt – jedoch erheblich. Neben der eigentlichen Verfeinerung oder Vergröberung muss auch die Lastverteilung sowie die Neuzuweisung der Punktnachbarschaften über Prozessgrenzen adaptiert werden. In einer vollständig verteilten Umgebung ist diese Aufgabe keinesfalls trivial, aber mittels dynamischer

Lastverteilung lösbar.

Neben der reinen Strömungsberechnung mit der LBGK-Methode wurden zudem weitere Transportmodelle realisiert, um die Klimatisierungs- und die Filterfunktionalität der Nase zu modellieren. Die dabei genutzten Methoden sind gut bekannt und werden in der Praxis sowohl in anderen Arbeiten zur Berechnung der Naseninnenströmung als auch in komplett abweichenden Problemstellungen verwendet. Auch hier stand zunächst die eigentliche Implementierung der Methode im Vordergrund, weniger ihre Anwendung auf eine realitätsnahe Konfiguration aus der klinischen Praxis. Insbesondere die Simulation der Filterfunktionalität mit Hilfe einer Partikel-Monte-Carlo-Simulation erwies sich als gut geeignet für diesen Zweck. Ein weiterer Bereich von für die Nasenatmung relevanten Partikeln konnte damit abgedeckt werden.

Experimentelle Vergleichsergebnisse aus klinischen Studien für diese Transportprozesse stehen jedoch weiterhin aus. Diese sind jedoch besonders im Zusammenhang mit Wärme- und Wasserdampftransport in der Nase unerlässlich. Besonders problematisch für die Simulation ist dabei die Formulierung der Randbedingungen, die wesentlich von der Interaktion der Luftströmung mit der Nasenschleimhaut bestimmt wird.

Die Vision der Operationsplanung am Computer („Computer aided surgery“, CAS), auch unter Zuhilfenahme der Strömungssimulation, scheint dem Autor in naher Zukunft realistisch. Besonders zeitkritisch stellt sich jedoch der Iterationszyklus aus Berechnung, Geometrieänderung und Neuberechnung dar. Dazu muss beispielsweise die Frage geklärt werden, wie realistisch das Strömungsproblem modelliert werden soll. Die eingesetzte Methode sollte flexibel genug sein, auf den jeweils erforderlichen Modellierungsgrad angepasst zu werden (z.B. Diskretisierung 1. Ordnung, Vortex confinement, Reduktion der Gitterauflösung auf Kosten der Genauigkeit).

Aus bisherigen Rechnungen und Vergleichen scheinen konventionelle Navier-Stokes-Löser, beispielsweise auf Basis eines Druckkorrekturverfahrens, den Lattice-Boltzmann-Methoden bei sehr hohen Reynolds-Zahlen überlegen zu sein. Dies bedarf noch eingehenden Untersuchungen. Es besteht offensichtlich noch ein Bedarf an mathematisch-numerischer Verfahrensentwicklung für die gaskinetischen LB-Methoden. Erste Ansätze in Richtung verbesserter Stabilitätseigenschaften sind z.B. in [16, 42] zu finden. Diese Ansätze sind jedoch noch nicht soweit ausgereift, dass sie für allgemeinere und komplexere Strömungsprobleme angewendet werden können.

Insgesamt bilden die LB-Verfahren trotz ihrer derzeitigen Nachteile bei hohen Reynoldszahlen zusammen mit den hier verwendeten kartesischen Octree-Gitterstrukturen ein leistungsfähiges Simulationsverfahren. Zu erwähnen ist hier der geringe Rechenaufwand pro Gitterpunkt und Zeitschritt, der hohe Parallelisierungsgrad und die schnelle Gittergenerierung, zusammen mit den zusätzlichen Modellansätzen für Klimatisierung und Partikeltransport. Das Gesamtkonzept bildet deshalb eine gute Grundlage für Verfahren im Bereich der Computer aided surgery.

Anhang A

Algorithmen

A.1 Octree-Punktsuche

Der Algorithmus zur Ermittlung eines Punktes in einer Punktliste ist von Ordnung $O(n)$, wenn nur dessen Ortskoordinaten (x, y, z) bekannt sind; dabei bezeichnet n die Länge der Liste.

Eine solche Suche kann erheblich beschleunigt werden, wenn eine Octree-Struktur eingesetzt wird. Dabei wird das quaderförmige Volumen, welches die Punktwolke umschließt, rekursiv in acht gleich große Teilvolumina (Oktanten) unterteilt. Jeder dieser Oktanten beinhaltet wiederum eine Untermenge der Punktwolke und wird seinerseits unterteilt. Dieser Vorgang wird so lange durchgeführt, bis jedes Teilvolumen eine festgelegte maximale Punkteanzahl m nicht mehr überschreitet. Die Anzahl der dafür erforderlichen rekursiven Aufteilungen wird mit l bezeichnet.

Wird die Punktwolke nun nach einem bestimmten Punkt mit den Koordinaten (x, y, z) durchsucht, werden zunächst, beginnend mit dem ersten Volumen, alle Oktanten rekursiv abgesucht, die diese Koordinaten enthalten. Da sich die Oktanten einer Rekursions Ebene nicht überlappen, sind hierfür genau l Rekursionen erforderlich, bis der feinste Oktant erreicht ist. Der Arbeitsaufwand für eine solche Rekursion beschränkt sich auf den Test, ob die Ortskoordinaten (x, y, z) im betrachteten Teilvolumen enthalten sind. Wenn dies der Fall ist, werden die Untervolumina abgesucht.

Hat der Algorithmus das feinste, als „Blatt“ bezeichnete Teilvolumen erreicht, werden die darin enthaltenen Punkte durchsucht und ihre Ortskoordinaten direkt verglichen. Wird der Punkt gefunden, kann seine Adresse ermittelt werden. Der Algorithmus ist in A.1 als Flussdiagramm dargestellt.

Der Aufwand für eine Octree-Suche kann wie folgt abgeschätzt werden. Unter der Annahme, dass jede Unterteilung die von einem Teilvolumen umschlossene Punktmenge

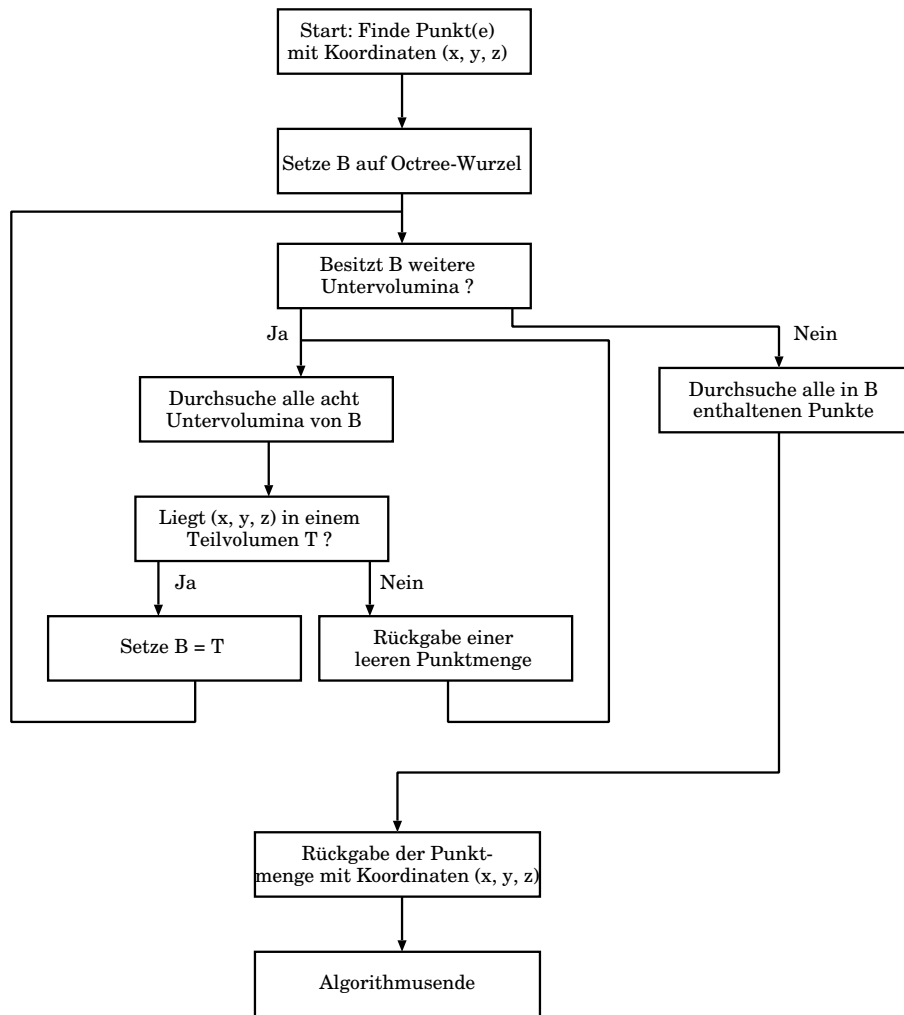


Abbildung A.1: Flussdiagramm der Octree-Punktsuche

exakt in acht Teilmengen zerlegt, gilt folgende Ungleichung:

$$\frac{n}{8^l} \leq m$$

$$\Leftrightarrow l \leq \log_8 \frac{n}{m}.$$

Die Anzahl der Operationen für eine kompletten Rekursion bis zum Blatt sind proportional zu l . Es folgen weitere Operationen zur Durchsuchung der Teilmenge der Punkte mit Länge m . Im Extremfall $m = 1$ gilt damit die Abschätzung $O(\log n)$ für eine Punktsuche.

A.2 Ermittlung der Elementnachbarschaft

Die Ermittlung der Elementnachbarschaft in einem Octree-Gitter wird an vielen Stellen benötigt, insbesondere bei der Gitterglättung und bei der Verfolgung von Partikeltrajektorien. Der zugehörige Algorithmus benötigt dabei zunächst das Ausgangselement, dessen Nachbar gefunden werden soll, sowie die Richtung, in der das Nachbarelement gesucht wird. Um das Verfahren anschaulich zu beschreiben, wird die Prozedur hier am Beispiel eines Quadtree's erläutert. Das Prinzip kann jedoch völlig analog auf den dreidimensionalen Octree übertragen werden. Abbildung A.2 stellt die möglichen Nachbarschaftsrichtungen eines Elements (Quadranten) sowie die Orientierung von möglichen Unterelementen dar.

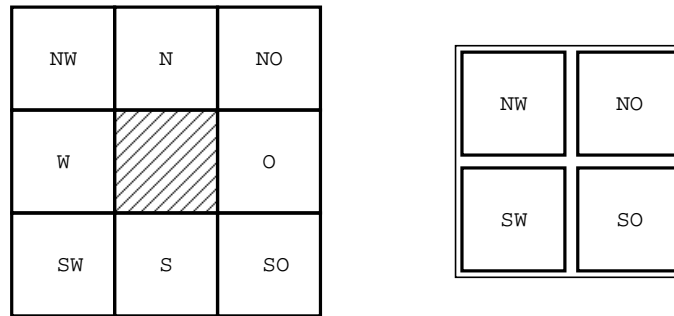


Abbildung A.2: Quadrant mit bezeichneten Nachbarschaftsrichtungen (links) und mit Unterelementen und deren Orientierung (rechts)

In Abbildung A.3 ist der Algorithmus als Flussdiagramm dargestellt. Beispielhaft wird hier der nördliche Nachbar \mathcal{R} eines Elements \mathcal{Q} gesucht.

Der Algorithmus liefert nicht notwendigerweise das benachbarte Blattelement zurück. Deshalb ist es normalerweise erforderlich, die Unterelemente des zurückgelieferten Quadranten \mathcal{R} zu durchsuchen. Für das erläuterte Beispiel ist eine Betrachtung der südlichen Unterelemente ausreichend.

Die benötigte Laufzeit für diesen Algorithmus ist proportional zur Tiefe des Quadtree's bzw. des Octree's, also $O(l)$.

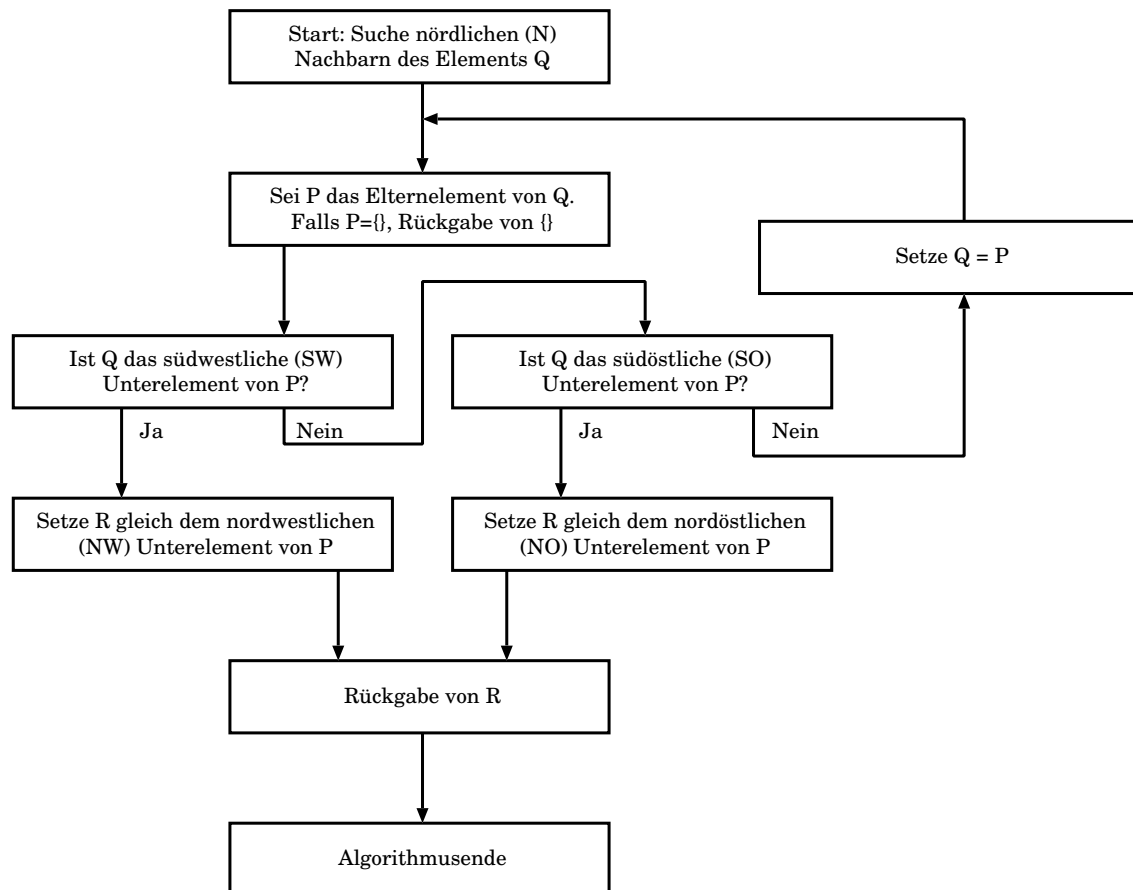


Abbildung A.3: Flussdiagramm der Nachbarsuche

Anhang B

Beweise

B.1 Stabilität der LBGK-Methode

Die Stabilität der LBGK-Methode kann relativ einfach mit Hilfe der von Neumann'schen Stabilitätsanalyse nachgewiesen werden. Das Iterationsschema der LBGK-Methode lautet nach Gleichung (2.20)

$$f_i^{n+1} = (1 - \Omega) f_{i-1}^n + \Omega f_{i-1}^{eq,n}$$

mit i als Ortsschritt in Richtung einer beliebigen molekularen Geschwindigkeit $\vec{\xi}_i$ und n als diskreten Zeitschritt sowie $\Omega > 0$. Die Korrekturform dieses Schemas lautet mit $\epsilon_i^n = f_i^n - f_i^{eq,n}$ und konstantem Quellterm $f_{i-1}^{eq,n}$:

$$\epsilon_i^{n+1} = (1 - \Omega) \epsilon_{i-1}^n. \quad (\text{B.1})$$

Die Korrekturvariable ϵ_i^n wird mit Hilfe einer Fourier-Reihe angesetzt:

$$\epsilon_i^n = V^n e^{I\Theta i} \quad (\text{B.2})$$

Die Größe I bezeichnet dabei die imaginäre Einheit $I = \sqrt{-1}$. Weiterhin gelten die Beziehungen

$$e^{I\Theta} = \cos \Theta + I \sin \Theta$$

und der Verstärkungsfaktor

$$G = \frac{V^{n+1}}{V^n} \leq 1 \quad (\text{B.3})$$

als notwendige Bedingung für ein stabiles Schema. Einsetzen des Fourier-Ansatzes (B.2) in das Schema (B.1) liefert

$$G = \frac{V^{n+1}}{V^n} = (1 - \Omega) e^{I\Theta} = (1 - \Omega) (\cos \Theta + I \sin \Theta).$$

Die Stabilitätsbedingung (B.3) wird zweckmäßig umgeformt zu

$$|G|^2 = \text{Re}^2 + \text{Im}^2 = (1 - \Omega)^2 (\cos^2 \Theta + \sin^2 \Theta) \leq 1$$

und damit

$$0 < \Omega \leq 2.$$

B.2 Herleitung von t_p

Bei der Formulierung der diskreten Gleichgewichtsverteilung f_i^{eq} wird unter Annahme kleiner Machzahlen $Ma = u/c_s \ll 1$ auf eine Taylorreihenentwicklung zurückgegriffen, die die kontinuierliche Gleichgewichtsverteilung F approximiert. Die Reihe wird bis zum 2. Glied entwickelt:

$$f^{eq} = F(v_\alpha = 0) + \frac{\partial F}{\partial v_\alpha} \Big|_{v_\alpha=0} \cdot v_\alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial v_\alpha \partial v_\beta} \Big|_{v_{\alpha,\beta}=0} \cdot v_\alpha v_\beta + O(v_\alpha^3).$$

Einsetzen der partiellen Ableitungen führt auf die Form

$$f_i^{eq}(\xi_{i,\alpha}, \rho, v_\alpha) = \rho t_{p,i} \left[1 + \frac{\xi_{i,\alpha} v_\alpha}{c_s^2} + \frac{v_\alpha v_\beta}{2c_s^2} \left(\frac{\xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta}}{c_s^2} - \delta_{\alpha\beta} \right) \right], \quad (\text{B.4})$$

wobei der konstante Vorfaktor

$$t_{p,i} = \frac{1}{(2\pi c_s^2)^{3/2}} \exp \left(-\frac{\xi_{i,\alpha}^2}{2c_s^2} \right)$$

eingeführt wurde.

Der Faktor hängt von dem Verhältnis $\xi_{i,\alpha}/c_s$ sowie von c_s alleine ab. Sein Betrag kann nach [20] durch Momentenbildung ermittelt werden.

Aufgrund der symmetrischen Anordnung des diskreten Geschwindigkeitsraumes folgt in Analogie zu (2.10) sofort, dass alle Momente über t_p mit ungradzahligen Potenzen verschwinden müssen, d.h.

$$\sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} = 0 \quad \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha}^3 = 0 \quad \text{und} \quad \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha}^5 = 0.$$

Weiterhin werden die diskreten Momente für Dichte, Impuls sowie den Spannungs- und Impulstensor (C.2) angesetzt. Dabei wird über alle von der Geschwindigkeitsrichtung i abhängigen Terme der Gleichung (B.4) summiert und die ungeradzahligen Potenzen

zu null gesetzt:

$$\begin{aligned}
\rho &= \sum_i f_i^{eq} = \rho \sum_i t_{p,i} + \frac{\rho v_\alpha v_\beta}{2 c_s^2} \left(\frac{1}{c_s^2} \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} - \delta_{\alpha\beta} \sum_i t_{p,i} \right) \\
\rho v_\alpha &= \sum_i \xi_{i,\alpha} f_i^{eq} = \frac{\rho v_\alpha}{c_s^2} \delta_{\alpha\beta} \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \\
\rho v_\alpha v_\beta + P \delta_{\alpha\beta} &= \sum_i \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} f_i^{eq} = \rho \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} + \\
&\quad \frac{\rho v_\alpha v_\beta}{2 c_s^2} \left(\frac{1}{c_s^2} \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \xi_{i,\gamma} \xi_{i,\delta} - \delta_{\alpha\beta} \sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \right). \quad (B.5)
\end{aligned}$$

Aus diesem Gleichungssystem folgen die weitaus einfacheren Beziehungen

$$\begin{aligned}
\sum_i t_{p,i} &= 1 \\
\sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \\
\sum_i t_{p,i} \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} \xi_{i,\gamma} \xi_{i,\delta} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}). \quad (B.6)
\end{aligned}$$

Diese Resultate können durch Einsetzen in das Gleichungssystem (B.5) verhältnismäßig leicht überprüft werden.

Der anschauliche Vergleich mit dem Differenzenstern der diskreten Phasenräume D2Q9 und D3Q15 (Abbildung 2.2) führt zu dem Schluss, dass die Koeffizienten $t_{p,i}$ für gleiches Betragsquadrat p ebenfalls gleich sind. Damit kann $t_{p,i}$ in den beiden genannten Fällen jeweils drei Werte annehmen. Darüber hinaus ist das noch unbekannte Verhältnis ξ_s/c_s zu ermitteln. Die dazu notwendigen vier Gleichungen können durch verschiedene Kombinationen der Indizes $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ in Gleichung (B.6) gebildet werden. Daraus folgen nach [20] für die Phasenräume D2Q9 und D3Q15 die Zahlenwerte

	p	t_{p,i}
D2Q9	0, 1, 2	4/9, 1/9, 1/36
D3Q15	0, 1, 3	2/9, 1/9, 1/72

und

$$\xi_s^2 = 3 \cdot c_s^2.$$

Analog können weitere Phasenräume aus symmetrischen Differenzensternen konstruiert werden.

Anhang C

Momententabelle

C.1 Momente der kontinuierlichen Verteilungsfunktion

Es folgt eine Aufstellung einiger physikalischer Momente für ideale Gase als Funktion der mit der Molekülmasse m erweiterten Verteilungsfunktion f . Die molekulare Geschwindigkeit ist $\vec{\xi}$, die makroskopische Geschwindigkeit ist \vec{u} und es gilt $\vec{c} = \vec{\xi} - \vec{u}$. Die aufgeführten Beziehungen wurden unmittelbar aus [20] übernommen.

Bezeichnung	Formelzeichen	Berechnungsvorschrift
Dichte	$\rho(\vec{x}, t)$	$\int_{\vec{\xi}} f d\vec{\xi}$
Impuls	$\rho \vec{u}(\vec{x}, t)$	$\int_{\vec{\xi}} \vec{\xi} f d\vec{\xi}$
Gesamtenergie	$\rho E(\vec{x}, t) = \rho (e + \vec{u}^2/2)$	$\frac{1}{2} \int_{\vec{\xi}} \xi^2 f d\vec{\xi}$
Spannungstensor	$\tau_{ij} = P \delta_{ij} - \sigma_{ij}$	$\int_{\vec{\xi}} c_i c_j f d\vec{\xi}$
Druck	P	$\frac{1}{3} \int_{\vec{\xi}} \vec{c}^2 f d\vec{\xi} = c_s^2 \int_{\vec{\xi}} f d\vec{\xi}$

Die Reibungsspannungen können als Differenz des Spannungstensors und der isotropen Drucks berechnet werden: $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - P \delta_{ij}$.

C.2 Diskrete Momente

Die wichtigsten Momente der diskreten Verteilungsfunktion f_i lauten

Bezeichnung	Formelzeichen	Berechnungsvorschrift
Dichte	$\rho(\vec{x}, t)$	$\sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}$
Impuls	$\rho v_\alpha(\vec{x}, t)$	$\sum_i \xi_{i,\alpha} f_i = \sum_i \xi_{i,\alpha} f_i^{eq}$
Gesamtenergie	$\rho E(\vec{x}, t)$	$\frac{1}{2} \sum_i \xi_{i,\alpha}^2 f_i = \frac{1}{2} \sum_i \xi_{i,\alpha}^2 f_i^{eq}$
Impuls- und Spannungstensor	$\rho v_\alpha v_\beta + P \delta_{\alpha\beta} + \sigma_{\alpha\beta}$	$\sum_i \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} f_i$
Reibungsspannungen	$\sigma_{\alpha\beta}$	$\sum_i \xi_{i,\alpha} \xi_{i,\beta} (f_i^{eq} - f_i)$

Literaturverzeichnis

- [1] BAEHR, H. D. ; STEPHAN, K.: *Wärme- und Stoffübertragung*. 3. Springer Verlag, 1998
- [2] BERG, M. de ; KREVELD, M. van ; OVERMARS, M. ; SCHWARZKOPF, O.: *Computational Geometry: Algorithms and Applications*. Springer Verlag, 2000
- [3] BERGER, M. J. ; COLELLA, P.: Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. In: *J. Comput. Phys.* 82 (1989), Nr. 1, S. 64–84. [http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90035-1](http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(89)90035-1). – DOI [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(89\)90035-1](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(89)90035-1). – ISSN 0021-9991
- [4] BHATNAGAR, P. ; GROSS, E. P. ; KROOK, M.: A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. In: *Physical Review* 94 (1954), S. 511–525
- [5] BOURGOIS, G.: *Mesh Generation for Finite Volume technique on Unstructured Grids*, Universite Catholique de Louvain, Diss., 1991
- [6] CHAPMAN, S. ; COWLING, T. G.: *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge University Press, 1952
- [7] CROUSE, B.: *Lattice-Boltzmann Strömungssimulationen auf Baumdatenstrukturen*, Technische Universität München, Diss., 2003
- [8] ERMAK, D. I. ; BUCKHOLZ, H.: Numerical integration of the Langevin equation: Monte Carlo simulation. In: *Journal of Computational Physics* 35 (1980), S. 169–182
- [9] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: Grid Refinement for Lattice-BGK Models. In: *Journal of Computational Physics* 147 (1998), November, Nr. 1, S. 219–228(10)
- [10] FILIPPOVA, O. ; HÄNEL, D.: A novel numerical scheme for reactive flows at low Mach numbers. In: *Computer Physics Communications* 129 (2000), S. 267–274
- [11] FINCK, M.: *Modulares Anwendungssystem für die Wissensintegration in den rechnergestützten Produktentwicklungsprozess*. 2004. – Diplomarbeit Universität Duisburg-Essen

- [12] FINCK, M.: Simulation of nasal flow by Lattice Boltzmann methods. In: *Conference on modelling fluid flow: Proceedings* Bd. 1 Budapest University of Technology and Economics, 2006, S. 523–530
- [13] FINCK, M. ; HÄNEL, D.: *Simulation of Particle Filtering in a Human Nasal Cavity*. 2007 . – Eingereicht bei Theoretical and Computational Fluid Dynamics
- [14] FINCK, M. ; HÄNEL, D. ; WLOKAS, I.: Simulation of nasal flow by lattice Boltzmann methods. In: *Computers in Biology and Medicine* 37 (2007), Nr. 6, S. 739–749
- [15] FRIEDLANDER, S. K.: *Smoke, Dust and Haze - Fundamentals of Aerosol Dynamics*. Second. Oxford Press, 2000
- [16] GEIER, M. ; GREINER, A. ; KORVINK, J. G.: *Properties of the cascaded Lattice Boltzmann automaton*. – Eingereicht bei International Journal of Modern Physics C
- [17] GLOTH, O.: *An Object-Oriented Finite Volume Framework and its Application to Fluid Dynamics Problems*, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2003
- [18] HÄNEL, D.: *Vorlesungsskript Grundlagen laminarer und turbulenter Strömungen*. 2003. – Univ. Duisburg-Essen
- [19] HÄNEL, D.: *Vorlesungsskript Numerische Fluidodynamik*. 2003. – Univ. Duisburg-Essen
- [20] HÄNEL, D.: *Molekulare Gasdynamik*. Springer-Verlag, 2004
- [21] HÄNEL, D. ; LANTERMANN, U. ; KAISER, R. ; WLOKAS, I.: Generalized lattice-BGK concept for thermal and chemically reacting flows at low Mach numbers. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51 (2006), S. 351–369
- [22] HÖRSCHLER, I. ; MEINKE, M. ; SCHRÖDER, W.: Numerical simulation of the flow field in a model of the nasal cavity. In: *Computers and Fluids* (2002)
- [23] KECK, T.: Untersuchungen zur Konditionierung der Atemluft in der Nase. In: *Laryngorhinootologie* 82 (2003), Nr. 4, S. 289–290
- [24] KIM, T. K.: *A Modified Smagorinsky Subgrid Scale Model for the Large Eddy Simulation of Turbulent Flow*, University of California, Davis, Diss., 2001
- [25] LANTERMANN, U.: *Simulation von Transport- und Depositionsvorgängen von Nanopartikeln in der Gasphase mittels Partikel-Monte-Carlo- und Lattice-Boltzmann-Methoden*, Universität Duisburg-Essen, Diss., 2006

- [26] LANTERMANN, U. ; HÄNEL, D.: Particle Monte Carlo and lattice-Boltzmann methods for simulations of gas-particle flows. In: *Computers & Fluids* 36 (2007), Februar, Nr. 2, S. 407–422
- [27] LORENSEN, W. E. ; CLINE, H. E.: Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm. In: *SIGGRAPH '87: Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. New York, NY, USA : ACM Press, 1987. – ISBN 0–89791–227–6, S. 163–169
- [28] MARTONEN, T. B. ; ZHANG, Z. ; YU, G. ; MUSANTE, C. M.: Three-Dimensional Computer Modelling of the Human Upper Respiratory Tract. In: *Cell Biochemistry and Biophysics* 35 (2001), December, Nr. 3, S. 255–261
- [29] MATERIALISE: *Mimics*. – URL: <http://www.materialise.com>
- [30] MEI, R. ; LUO, L. S. ; SHYY, W.: An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method. In: *J. Comput. Phys.* 155 (1999), Nr. 2, S. 307–330. <http://dx.doi.org/http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6334>. – DOI <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1999.6334>. – ISSN 0021–9991
- [31] MÜRMANN, D.: *Untersuchung eines Ansatzes zur Erzeugung einer Naseninnen-geometrie im 3D-CAD*. Juni 2005. – Diplomarbeit, Universität Duisburg-Essen
- [32] NEMA - NATIONAL ELECTRICAL MANUFACTURERS ASSOCIATION: *Digital Imaging and Communications in Medicine*. – URL: <http://medical.nema.org>
- [33] OMG OBJECT MANAGEMENT GROUP: *CORBA: Component Object Request Broker Architecture*. – URL: <http://www.corba.org>
- [34] OPEN CASCADE TECHNOLOGY: *Open CASCADE Technology, 3D modeling & numerical simulation*. – URL: <http://www.opencascade.org>
- [35] OPITZ, R. ; LIMBERG, W.: Experimentelle Untersuchungen der Strömung in einem Nasenmodell. In: *Abhandlungen aus dem Aerodynamischen Institut der RWTH Aachen*. RWTH Aachen, 1996, S. 120–169
- [36] PERRY, R. H. ; GREEN, D. W.: *Perry's Chemical Engineer's Handbook*. 7. Mc Graw Hill, 1997
- [37] PUDER, A. ; RÖMER, K.: *MICO: An Open Source CORBA Implementation*. dpunkt Verlag, 2000
- [38] QIAN, Y.H. ; D'HUMIERES, D. ; LALLEMAND, P.: Lattice BGK for Navier-Stokes equation. In: *Europhysics Letters* 17 (1992), Nr. 6, S. 479–484

- [39] QUIRK, J. J.: *An Adaptive mesh refinement algorithm for computational shock hydrodynamics*, Cranfield Institute of Technology, Diss., 1991
- [40] SCHÄFER, M.: *Numerik im Maschinenbau*. Springer Verlag, 1999
- [41] SCHÄFER, M. ; TUREK, S.: Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. In: *Notes in Numerical Fluid Mechanics* 52 (1996), S. 547–566
- [42] SHU, C. ; NIU, X. D. ; CHEW, Y. T. ; CAI, Q. D.: A fractional step lattice Boltzmann method for simulating high Reynolds number flow. In: *Mathematics and Computers in Simulation* 72 (2006), S. 201–205
- [43] SMAGORINSKY, J.: General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I. The Basic Experiment. In: *Mon. Weather Rev.* 91 (1963), S. 99–164
- [44] SPURK, J. H.: *Strömungslehre. Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer-Verlag, 1993
- [45] VILSMEIER, R.: *Lösung der Erhaltungsgleichungen auf unstrukturierten Gittern*, Gerhard-Mercator-Universität Duisburg, Diss., 1996
- [46] ZHAO, K. ; SCHERER, P. W. ; HAJILOO, S. A. ; DALTON, P.: Effect of Anatomy on Human Nasal Air Flow and Odorant Transport Patterns: Implications for Olfaction. In: *Chemical Senses* 29 (2004), Nr. 5, S. 365–379